

DUFLOW
Procesbeschrijvingen
(versie 3, inclusief PC-Lake)

99 21

Publicaties en het publicatie-
overzicht van de STOWA kunt u
uitsluitend bestellen bij:
Hageman Verpakkers BV
Postbus 281
2700 AC Zoetermeer
o.v.v. ISBN- of bestelnummer en
een duidelijk afleveradres.
ISBN 90.5773.071.5

Ten geleide

DUFLOW is een pakket voor de simulatie van waterbeweging en waterkwaliteit in oppervlaktewatersystemen, dat de STOWA voor haar deelnemers - de regionale waterbeheerders - heeft laten ontwikkelen. Voor waterkwaliteit biedt het pakket de mogelijkheid om als gebruiker zelf processen te definiëren en deze op eenvoudige wijze te implementeren.

Standaard worden met DUFLOW twee waterkwaliteitsmodellen mee geleverd. Dit zijn beide eutrofiëringsmodellen. In de praktijk is gebleken dat het bij een aantal gebruikers aan tijd en/of expertise ontbreekt om zelf andere modellen in DUFLOW te ontwikkelen. Doel van dit project is om een aantal kant en klare modellen aan te bieden die gebruikt kunnen worden voor een breed scala aan waterkwaliteitsproblemen. Door deze opzet is het mogelijk DUFLOW voor verschillende waterkwaliteitsproblemen toe te passen.

De waterkwaliteitsmodellen zijn bewust zo eenvoudig mogelijk gehouden en gericht op toepassingen in de dagelijkse praktijk van het waterbeheer. Elke set procesbeschrijvingen is voorzien van een handleiding, waarin naast een beschrijving van de vergelijkingen aandacht wordt geschonken aan de benodigde invoer. Bij elk model is een uitgewerkt voorbeeld, ontleend aan de praktijk, toegevoegd.

De volgende modellen zijn opgenomen: een model conservatieve stof; eerste orde afbraak; zuurstofhuishouding; slibtransportmodellen voor stromende wateren en ondiepe meren; een model voor het lichtklimaat onder water; een eenvoudig en een complex eutrofiëringsmodel; een model voor algengroei in diepe putten; modellen voor zware metalen en organische micro- verontreinigingen en een model voor watertemperatuur.

De waterkwaliteitsmodellen zijn ontwikkeld door de Landbouwwuniversiteit Wageningen onder leiding van een projectteam met als projectleider ir. R.H. Aalderink van de leerstoelgroep Aquatische Oecologie en Waterkwaliteitsbeheer. Projectmedewerkers waren: prof. dr. L. Lijklema, ir. G. Blom, ir. J. Icke en ir. H. De Ruiter.

Het project is begeleid door een begeleidingscommissie bestaande uit: ir. W.J. Potthoff [voorzitter] (Dienst Waterbeheer en Riolerings Amsterdam), drs. T. Aldenberg (RIVM), ir. J. Van Dansik (Hoogheemraadschap van Delfland, dhr. G. Berger (Gemeentewerken Rotterdam), dr. ir. L.M. van der Heidt (RIZA), ir. J.D. Leenen (DHV), mw. ir. R. Groen (Zuiveringschap Hollandse Eilanden en Waarden) en ir. L.R. Wentholt (STOWA).

In verband met het gereed komen van de WINDOWS-versie van DUFLOW (v. 3.0) zijn de waterkwaliteitsmodellen en de uitgewerkte voorbeelden omgezet van de DOS-versie naar de WINDOWS-versie. Tevens is de handleiding aangepast. Deze werkzaamheden zijn uitgevoerd door mw. ir. E.M.T.E. Flipsen en de heer ir. R.H. Aalderink van ARCADIS Heidemij Advies.

Als extra hoofdstuk is toegevoegd de door ir. M.H.J.L. Jeuken van het RIVM uitgevoerde omzetting van het model PCLake (een complex eutrofiëringsmodel voor meren) naar een waterkwaliteitsprocesbeschrijving voor DUFLOW.

Dit nieuwe rapport vervangt de oude uitgave 12 (STOWA rapport 96-22 en 98-18).

Utrecht, oktober 1999

De directeur van de STOWA

ir. J.M.J. Leenen

Voorwoord

In juli 1998 verschenen een twaalfstal procesbeschrijvingen, ontwikkeld door de Landbouwwuniversiteit Wageningen in opdracht van STOWA. Deze procesbeschrijvingen zijn gemaakt voor DUFLOW, versie 2.05 in DOS-omgeving. Inmiddels is DUFLOW ook verkrijgbaar in een versie voor Windows. Arcadis Heidemij Advies heeft daarom in opdracht van STOWA de procesbeschrijvingen voor DUFLOW versie 2.05 getest en aangepast in DUFLOW voor Windows 95/NT versie 3.0. Bovendien is de handleiding van de procesbeschrijvingen aangepast.

In deze handleiding staan de procesbeschrijvingen waterkwaliteit centraal. Voor details ten aanzien van de mogelijkheden van DUFLOW voor Windows wordt verwezen naar de handleiding 'DUFLOW for Windows, User's guide Dufflow Modelling Studio' (STOWA rapport 98/19).

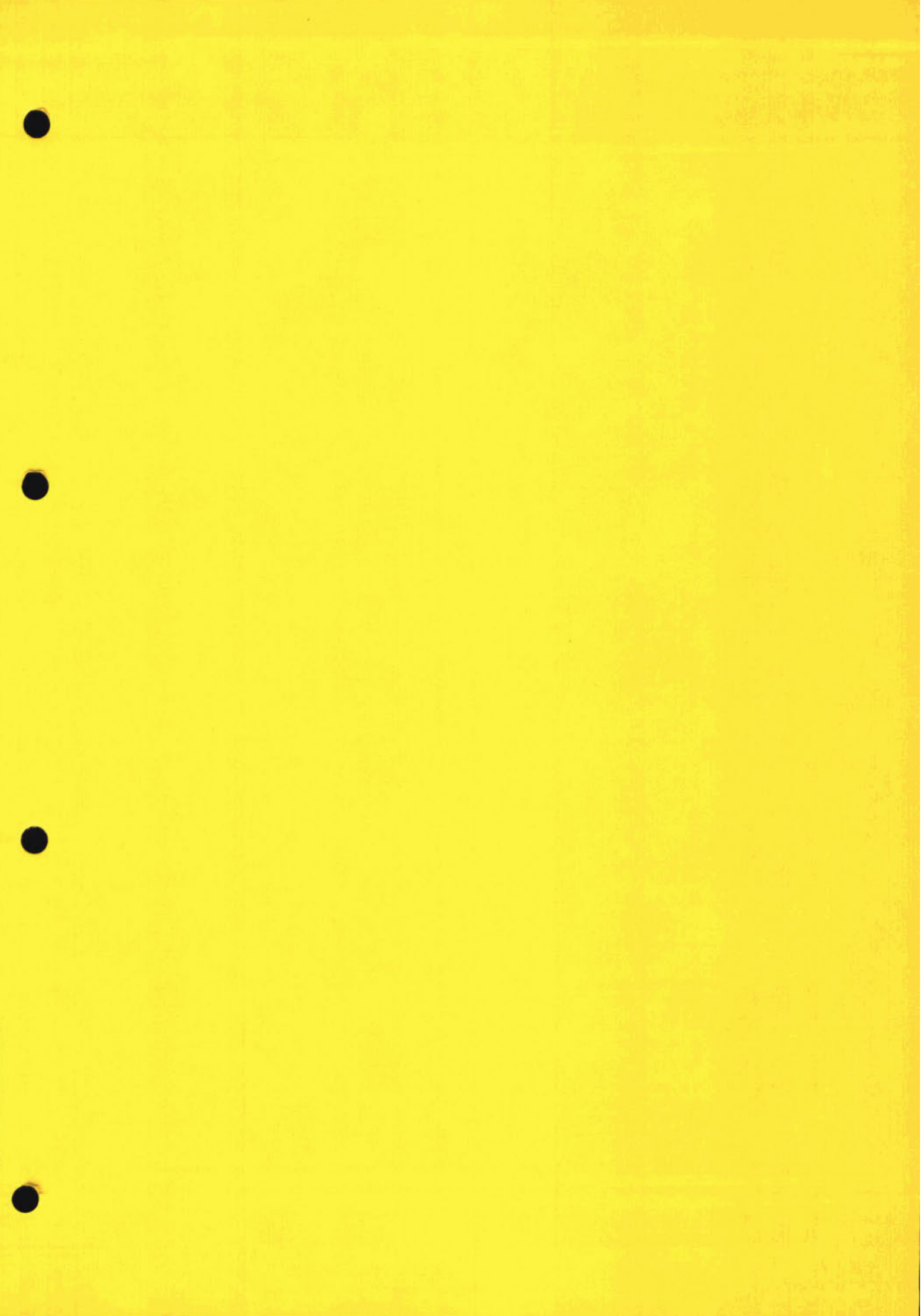
De invoerschermen zijn niet telkens in de tekst opgenomen, daar alle invoerbestanden zijn bijgeleverd. Er is voor gekozen de invoerschermen alleen in de tekst op te nemen, wanneer het scherm informatie aan de tekst toevoegt.

Het merendeel van de figuren in deze handleiding zijn overgenomen uit de handleiding die de procesbeschrijvingen binnen de DOS versie beschrijft. Afgezien van de layout zijn de resultaten van de berekeningen namelijk het zelfde en was het bij het ter perse gaan van deze handleiding nog niet mogelijk om simulatieresultaten te exporteren, waardoor een duidelijke presentatie van de resultaten mogelijk is.

Inhoud

Dit boek is per hoofdstuk gepagineerd.
Elk hoofdstuk bevat een aparte inhoudsopgave.

Conservatieve stof	1
Eerste orde afbraak	2
Zuurstofhuishouding <i>in stromende en stagnante watersystemen</i>	3
Slibstroom <i>een slibtransportmodel voor stromende wateren</i>	4
Slibmeer <i>een slibtransportmodel voor ondiepe meren</i>	5
Het lichtklimaat onder water	6
EUTROF1A	7
EUTROF2A	8
Model PUT <i>simulatie van fosfaat- en licht-gelimitteerde algengroei ...</i>	9
OMIVE <i>model voor organische micro-verontreinigingen</i>	10
METAL <i>model voor zware metalen (As, Cu, Ni, Zn, Pb)</i>	11
Watertemperatuur	12
PCLake <i>eutrofiëringsmodel van het RIVM</i>	13





PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Conservatieve stof

juni 1997

R.H. Aalderink

*Landbouwuniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

Inhoudsopgave

1.1 Conservatieve stof 5

- 1.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5
- 1.1.2 Fictieve tracer 5
- 1.1.3 Werkelijke verontreinigingen 6
- 1.1.4 Beperkingen 6

1.2 Procesbeschrijvingen 7

1.3 Benodigde invoer 7

- 1.3.1 Initiële condities 8
- 1.3.2 Randvoorwaarden 8
- 1.3.3 Parameters 9
- 1.3.4 Externe variabelen 9

1.4 Voorbeeld Oranjeplas 12

- 1.4.1 Situatieschets 12
- 1.4.2 DufLOW invoer 13
- 1.4.3 Resultaten 16

Literatuur 19

Bijlagen

- Bijlage 1* Procesbeschrijvingen Conservatieve stof (ZOUT.MOD) 20
- Bijlage 2* Overzicht van de DUFLOW-bestanden en doorgerekende alternatieven 21
- Bijlage 3a* Enige waarden voor de dispersiecoëfficiënt in een aantal rivieren en beken 22
- Bijlage 3b* Enige waarden voor de dispersieconstante in sloten en langzaamstromende systemen 24

1.1 Conservatieve stof

Een conservatieve stof is alleen onderhevig aan transport. Een dergelijke stof wordt niet afgebroken en er vindt ook geen productie plaats. Dat betekent dat voor het beschrijven van het gedrag van een dergelijke stof alleen de advection- en dispersieterm in de stoftransportvergelijking van belang zijn. Voorbeelden zijn chloride en stoffen die als tracer worden gebruikt. Ook voor stoffen met een grote halfwaardetijd, die dus slechts langzaam worden afgebroken, kan het gedrag als conservatief worden beschouwd. In het laatste geval is met name de verhouding tussen de afbraaksnelheid en de snelheid van transport van belang. In dit model wordt slechts het gedrag van een conservatieve stof in de waterfase beschreven. De uitwisseling tussen het sediment en de waterkolom wordt niet beschreven.

1.1.1 Toepassingsmogelijkheden

De toepassingsmogelijkheden van dit model zijn onder te verdelen in twee categorieën. In de eerste plaats kan het model worden gebruikt om het gedrag van werkelijke stoffen te simuleren. Daarnaast kan het model ook worden gebruikt om het gedrag van een systeem te bestuderen door een fictieve tracer te definiëren en bijvoorbeeld de verspreiding hiervan in het systeem te simuleren. Hieronder worden een aantal toepassingsmogelijkheden opgesomd.

Toepassingen voor een fictieve tracer:

- testen van een applicatie op behoud van massa;
- beschrijven van transport in een systeem;
- indringing van gebiedsvreemd water.

Toepassingen voor een werkelijke stof:

- controle waterbalans;
- zoutindringing;
- analyse van tracerexperimenten;
- calamiteiten.

1.1.2 Fictieve tracer

Voor dergelijke toepassingen wordt een fictieve stof gedefinieerd, waarmee het gedrag van het systeem kan worden bestudeerd. Een goede test om na te gaan of het model voor het te simuleren netwerk het transport op de juiste wijze beschrijft, kan worden uitgevoerd door voor alle systeemgrenzen (inclusief de lozingen) een constante kwaliteit als randvoorwaarde te definiëren. Door nu ook dezelfde initiële concentratie op alle knopen in het netwerk te definiëren kan eenvoudig worden nagegaan of het model voor het netwerk goed werkt. Immers in dat geval moet de concentratie overal in het netwerk constant blijven en gelijk zijn aan de waarde die gebruikt is als initiële conditie en is toegekend aan de randvoorwaarden. Is dit niet het geval dan dient de schematisering van het netwerk te worden aangepast. De oorzaak moet veelal worden gezocht in fouten in de invoer, of in het optreden van numerieke problemen. In de praktijk ziet men vaak dat tijdelijk kleine afwijkingen van de constante concentratie

optreden. Indien de afwijkingen niet groter zijn dan enkele procenten hoeft men zich hier geen zorgen over te maken.

Een andere berekening die het inzicht in het functioneren van het systeem kan vergroten, is een simulatie waarbij als initiële concentratie overal in het netwerk een waarde van nul wordt opgegeven en aan alle of een aantal randvoorwaarden een constante kwaliteit wordt toegekend. Op deze wijze kan eenvoudig een indruk worden verkregen van de verblijftijd(spreiding) in het systeem.

Een derde toepassing, waarbij ook gebruik wordt gemaakt van een fictieve stof is het onderzoek naar de indringing van gebiedsvreemd water. Ook in dit geval wordt op één of meer randen een fictieve concentratie gezet en wordt als initiële concentratie overal in het netwerk een waarde van nul gebruikt. Simulatie leert dan hoe het gebiedsvreemde water zich in het netwerk verspreidt.

1.1.3 Werkelijke verontreinigingen

Simulatie van chloride in een systeem kan worden gebruikt om na te gaan of de waterbalans die men heeft opgesteld voor het systeem sluitend is. Door aan alle termen in de waterbalans een chloridegehalte toe te kennen en vervolgens het gemeten en gesimuleerde verloop in het systeem met elkaar te vergelijken kan men nagaan of de waterbalans klopt. Uiteraard dient men hiervoor een voldoende nauwkeurige schatting te hebben van de chloridegehalten in de diverse toevoerstromen van het systeem.

Het model kan uiteraard ook worden gebruikt om het gedrag en de verspreiding van chloride in een systeem te bestuderen. Verspreiding van zoute kwel en indringing van zout in een estuarium zijn voorbeelden waar deze problematiek speelt. Met behulp van het model kunnen inlaat- en doorspoelstrategieën worden ontwikkeld en geoptimaliseerd.

Tracer experimenten worden uitgevoerd om de verblijftijd(spreiding) en de dispersie in een systeem te bepalen. Met behulp van het model kunnen dergelijke experimenten worden geanalyseerd en kan door middel van kalibratie een geschikte waarde voor de dispersieconstante worden vastgesteld.

Tenslotte kan het model worden gebruikt om het effect van een kortdurende pulslozing te bestuderen. Hiertoe kan gedurende een korte tijd een piekbelasting als randvoorwaarde worden opgelegd, of kan op een bepaalde knoop een verhoogde initiële concentratie worden opgegeven. Op deze wijze kan de verspreiding van een verontreiniging na bijvoorbeeld een calamiteit worden gesimuleerd.

1.1.4 Beperkingen

DUFLOW is een 1-dimensionaal model, wat betekent dat er wordt gerekend met een over de breedte en diepte gemiddelde concentratie.

Indien men geïnteresseerd is in de over y- of z-richting optredende verschillen in concentratie, dan is DUFLOW niet geschikt. In dergelijke gevallen moeten twee- of driedimensionale modellen worden gebruikt. Laterale concentratiegradiënten kunnen bijvoorbeeld optreden in brede traag stromende systemen over een traject stroomafwaarts van een lozingspunt. Een voorbeeld van het optreden van verticale concentratiegradiënten vindt men in estuaria op de scheiding van zout/zoet ten gevolge van het optreden van dichtheidsgradiënten. Dergelijke gradiënten beïnvloeden ook de stroming. De wederzijdse beïnvloeding van waterbeweging en waterkwaliteit wordt niet

door DUFLOW beschreven.

Het in dit hoofdstuk beschreven model simuleert slechts het gedrag van een conservatieve stof in de waterkolom. Dat betekent dat uitwisseling tussen sediment en water niet wordt meegenomen. Met behulp van het model kan dus niet de opbouw en verdunning van verontreinigingen in het sediment worden gesimuleerd. Het is echter wel mogelijk het model op eenvoudige wijze uit te breiden, zodat dit wel tot de mogelijkheden behoort. In dat geval moet de uitwisseling tussen sediment en water ten gevolge van diffusie, sedimentatie en resuspensie worden beschreven. Dit kan op analoge wijze worden gedaan als in het model voor zware metalen (zie hoofdstuk 8).

1.2 Procesbeschrijvingen

De procesbeschrijvingen voor dit model zijn eenvoudig (zie bijlage 1). Daar een conservatieve stof niet onderhevig is aan afbraak en ook niet wordt geproduceerd zijn alleen de advection- en dispersieterm in de massatransportvergelijking van belang. Deze termen worden standaard in het rekenhart van DUFLOW meegenomen. De gebruiker rest slechts de stof te definiëren.

Als naam voor de conservatieve stof is chloride gekozen. Dit is echter een arbitraire keuze. De naam kan eventueel worden veranderd door deze te wijzigen in het ZOUT.MOD bestand. Deze verandering in het kwaliteitsmodel kan aangebracht worden door in het 'scenario' menu bij de opdracht 'quality model' te kiezen voor optie 'edit'. Wanneer de naam in het kwaliteitsmodel gewijzigd is, zal de nieuw gekozen naam ook in de in- en uitvoer-schermen verschijnen.

1.3 Benodigde invoer

Hier wordt de invoer met betrekking tot de kwaliteit beschreven. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging, wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding.

Algemeen geldt dat ten behoeve van een waterkwaliteitssimulatie, de volgende invoer moet worden opgegeven:

- initiële condities;
- randvoorwaarden inclusief puntlozingen;
- parameters;
- externe variabelen (inclusief de dispersie)

Tabel 1.1 Benodigde invoer model conservatieve stof

type	naam	bron
Initiële conditie	Cl waterkolom	meting/fictieve waarde
Randvoorwaarden	Cl systeemgrens Cl puntlozingen	meting/fictieve waarde meting/fictieve waarde
Parameters	-	-
Externe variabelen	D Dispersieconstante	tracerexperiment concentratieprofiel literatuur

1.3.1 Initiële condities

Op elke knoop in het netwerk moet de concentratie van de conservatieve stof op het tijdstip van aanvang van de simulatie ($t=0$) worden gegeven.

Gaat het om de beschrijving van een werkelijke stof, dan worden vaak gemeten concentraties gebruikt om een schatting van de initiële condities te verkrijgen. Met name in complexe netwerken, waar grote ruimtelijke verschillen in concentratie mogen worden verwacht, is het vaak niet eenvoudig om overal in het netwerk een verantwoorde keuze voor de initiële conditie te maken. In dat geval kan men een schatting verkrijgen van de ruimtelijke verdeling van een stof in het systeem, door een aantal inleidende berekeningen uit te voeren, waarbij men een eerste ruwe schatting van de initiële condities gebruikt. Zo gauw zich dan een min of meer stationaire situatie heeft ingesteld, gebruikt men de op deze wijze berekende concentratieverdeling in het systeem als schatting voor de initiële condities voor de eigenlijke simulatie. Het gebruik van de optie *new initial conditions*, te vinden in de scenario manager is hierbij handig. Het op deze wijze inrekenen van een model lukt goed indien het systeem stationair is, dat wil zeggen dat de waterbeweging, het debiet en de kwaliteit van de lozingen redelijk constant zijn. Voor dynamische systemen moet de nodige voorzichtigheid worden betracht, omdat voor dergelijke netwerken nooit een stationaire situatie wordt bereikt. In dat geval dient men de fout, die gemaakt wordt door een verkeerde keuze voor de initiële condities, voor lief te nemen of men dient over gedetailleerde informatie te beschikken over de ruimtelijke verdeling van de stof, verkregen uit een intensief meetprogramma. De gevoeligheid voor de initiële condities hangt met name af van de verblijftijden in de diverse delen van het netwerk. Indien de verblijftijd kort is ten opzicht van de simulatieperiode, zal het effect van een foute keuze voor de concentratie op tijdstip $t=0$ snel verdwijnen. Is daarentegen de verblijftijd lang dan kan de keuze van de initiële concentratie wel degelijk van invloed zijn op de modeluitkomsten. Uiteraard speelt ook de duur van de simulatie hierbij een rol. Bepalend is de verhouding tussen de verblijftijd en de simulatieduur.

Indien het model wordt gebruikt om het gedrag van het systeem te bestuderen met behulp van een fictieve stof, dan is men uiteraard vrij in het kiezen van de initiële gehalten in het netwerk. In veel gevallen is het dan handig een beginconcentratie gelijk aan nul te kiezen.

1.3.2 Randvoorwaarden

Op de geografische randen moet de toestand van het systeem worden opgegeven. Daarnaast worden in DUFLOW ook alle puntlozingen als randvoorwaarden behandeld. Voor elke debiet- of peilrand in het waterbewegingsmodel moet een randvoorwaarde voor de kwaliteit worden ingevoerd. Deze weerspiegelt de kwaliteit van het water dat het netwerk binnenkomt of dat op het netwerk wordt geloosd. Voor elke toestandsvariabele die wordt gedefinieerd, moet een randvoorwaarde worden ingevoerd. In dit model voor een conservatieve stof gaat het slechts om de concentratie van één stof.

Ook voor de randvoorwaarden moet onderscheid worden gemaakt tussen toepassingen, waarbij het gaat om de beschrijving van werkelijkheid en simulaties met een fictieve tracer ter bestudering van het gedrag van een systeem. In het laatste geval is men uiteraard wederom vrij in de keuze van de randvoorwaarde. Gaat het om de beschrijving van een werkelijke stof als chloride, dan moeten werkelijke concentraties

en belastingen worden ingevoerd. Voor puntlozingen kan vaak de kwaliteit van het geloosde water worden gemeten. Hierbij kan eventueel rekening worden gehouden met variaties in de tijd door de randvoorwaarde op te geven als een tijdfunctie. Of het model gevoelig is voor een bepaalde randvoorwaarde is afhankelijk van de bijdrage hiervan aan de totale belasting van het systeem en de initiële verdunning, die optreedt na het lozingspunt.

1.3.3 Parameters

Voor dit model zijn geen parameters gedefinieerd. De dispersieconstante wordt ingevoerd onder externe variabelen.

1.3.4 Externe variabelen

Externe variabelen in DUFLOW zijn in principe alle variabelen, die in tijd of plaats kunnen variëren. Ook de dispersiecoëfficiënt wordt in DUFLOW als externe variabele opgegeven.

De waarde van de dispersiecoëfficiënt kan van systeem tot systeem sterk variëren. Bijlage 3 geeft een overzicht van dispersieconstanten, zoals die zijn gemeten in een aantal nederlandse en buitenlandse wateren. In de literatuur worden een aantal empirische vergelijkingen gevonden, die de waarde van de dispersiecoëfficiënt relateren aan de karakteristieken van het systeem (zie bijvoorbeeld Fischer et.al, 1979). Een veel gebruikte relatie is die volgens Elder:

$$[1] \quad D = C_e n u R^{\frac{5}{6}} \sqrt{g}$$

waarin:

- D dispersiecoëfficiënt (m²/s)
- C_e evenredigheidsconstante (m^{1/6})
- g valversnelling (m/s²)
- n Manningconstante (s/m^{1/3})
- u stroomsnelheid (m/s)
- R hydraulische straal (m)

De waarde van de evenredigheidsconstante C_e bedraagt 1910, indien SI eenheden worden gebruikt. Als de ruwheid van de watergang wordt uitgedrukt met de Chezy waarde, dan gaat vergelijking 1 over in:

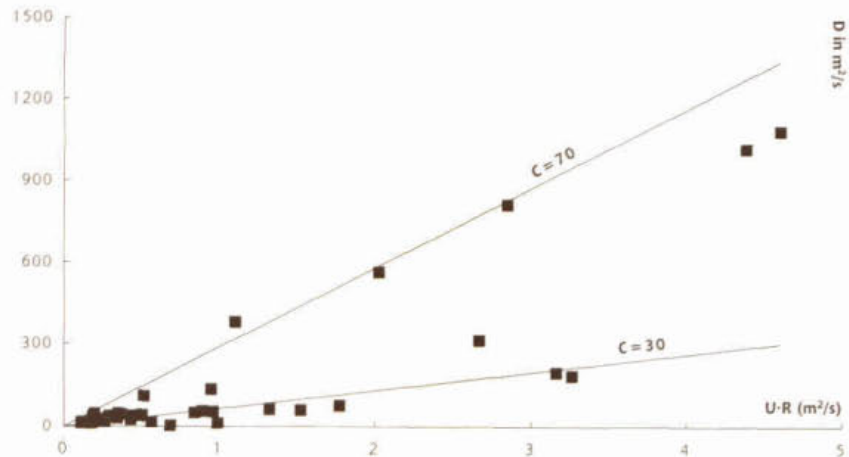
$$[2] \quad D = C_e u \frac{R}{C} \sqrt{g}$$

waarin: C Chezy waarde (C=R^{1/6}/n) (m^{1/2}/s)

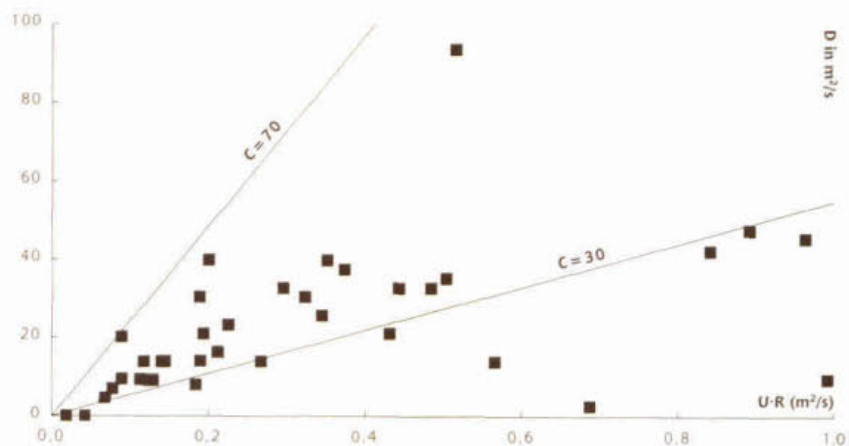
In figuur 1.1 is voor de systemen weergegeven in bijlage 3 de waarde van D uitgezet tegen uΣR. In principe is het verband tussen beide grootheden lineair. Uit de figuur blijkt dat de spreiding erg groot is. Er moet echter worden opgemerkt dat D volgens vergelijking 2 ook afhangt van de Chezy waarde. De waarde voor Chezy is voor de weergegeven systemen echter niet bekend. Vandaar dat in figuur 1.1 tevens de lijnen volgens vergelijking 2 zijn uitgezet voor een waarde voor C van 30 (ruw) en 70 (glad). Het blijkt dan dat de spreiding voor een groot deel kan worden verklaard uit de moge-

lijke variatie in de Chezy waarde. Een aantal systemen echter lijkt niet te voldoen aan de relatie volgens Elder en valt buiten het weergegeven bereik op grond van minimale en maximale waarden voor de Chezy waarde. Toch blijkt uit figuur 1.1 dat met behulp van vergelijking 2 een redelijke schatting van de dispersiecoëfficiënt kan worden verkregen.

Figuur 1.1 [a] Dispersie als functie van $u \cdot R$ voor een aantal stromende systemen.



[b] Detail van a



De systemen vermeld in bijlage 3 zijn vrijwel allemaal rivieren en beken. Over meer stagnante systemen als sloten, weteringen etc. zijn in de literatuur veel minder waarden voor de dispersiecoëfficiënt te vinden. Een aantal waarden worden gegeven door de Heer (1979) voor sloten en kleine watergangen. Deze waarden zijn eveneens opgenomen in bijlage 3. Ook voor deze systemen blijkt dat de spreiding in de experimenteel bepaalde waarden groot is. Juist voor sloten zal de waarde van de dispersieconstante sterk afhangen van de ruwheid. Deze wordt vooral bepaald door de vegetatie, zodat het maaibeheer een grote invloed kan hebben op de dispersie.

Overigens zal in de wat bredere langzaam stromende watergangen de dispersie vooral worden gecontroleerd door de wind. Voor een tweetal sloten vond Abbink

Spaink (1995) waarden in de orde van grootte van $100 \text{ m}^2/\text{dag}$ bij doorstromsnelheden van ca. $6 \text{ m}/\text{dag}$. De mate van beschutting speelt hierbij ook een rol.

Is het noodzakelijk de waarde van de dispersie nauwkeuriger vast te stellen dan kan men deze ook experimenteel bepalen. Hiertoe wordt gebruik gemaakt van een tracer. Een hoeveelheid tracer wordt als een pulslozing toegediend aan het systeem en benedenstrooms wordt het verloop van de concentratie als functie van de tijd gemeten. Er zijn verschillende methoden om uit de resultaten van tracerexperimenten de dispersiecoëfficiënt te bepalen. Zo kunnen de resultaten worden verwerkt met een model voor het systeem door simulatie van het experiment. Door de waarde van de dispersiecoëfficiënt te variëren kan dan het gemeten en gesimuleerde verloop van de concentratie op de meetpunten benedenstrooms zo goed mogelijk met elkaar in overeenstemming worden gebracht. Een andere methode, die veel wordt gebruikt, is de methode der momenten. Uit de gemiddelde verblijftijd van de tracer en de variantie van het gemeten verloop benedenstrooms kan de dispersieconstante worden berekend. Een uitgebreide beschrijving van deze methode kan o.a. worden gevonden in Thoman en Mueller (1987), waarin ook aandacht wordt geschonken aan de opzet van tracerexperimenten.

In sommige gevallen is het ook mogelijk gebruik te maken van de variaties in de geloosde vracht van een conservatieve stof. Zo vertonen effluentlozingen vaak een dag/nacht ritme, hetgeen kan worden teruggevonden in een variatie in het geleidingsvermogen benedenstrooms een lozingspunt. Door op een aantal punten benedenstrooms continu het geleidingsvermogen te registreren, kan dan bijvoorbeeld m.b.v. curve fitting een schatting van de dispersiecoëfficiënt worden verkregen. Voor (semi)-stationaire systemen kan eventueel uit de concentratiegradiënten, bijvoorbeeld benedenstrooms een lozingspunt, direct een schatting van de dispersiecoëfficiënt worden verkregen. In dat geval geldt:

$$[3] \quad c_x = c_0 e^{\left(\frac{-ux}{D}\right)}$$

waarin:

- c_x concentratie als functie van de afstand benedenstrooms (g/m^3)
- c_0 concentratie op het punt $x=0$ (g/m^3)
- u stroomsnelheid (m/s)
- D dispersieconstante (m^2/s)
- x afstand tot het punt $x=0$ (m)

Hierbij wordt aangenomen dat de concentratie op $x=\infty$ gelijk aan 0 is. Voor een uitgebreide toelichting zie Thoman en Mueller (1987).

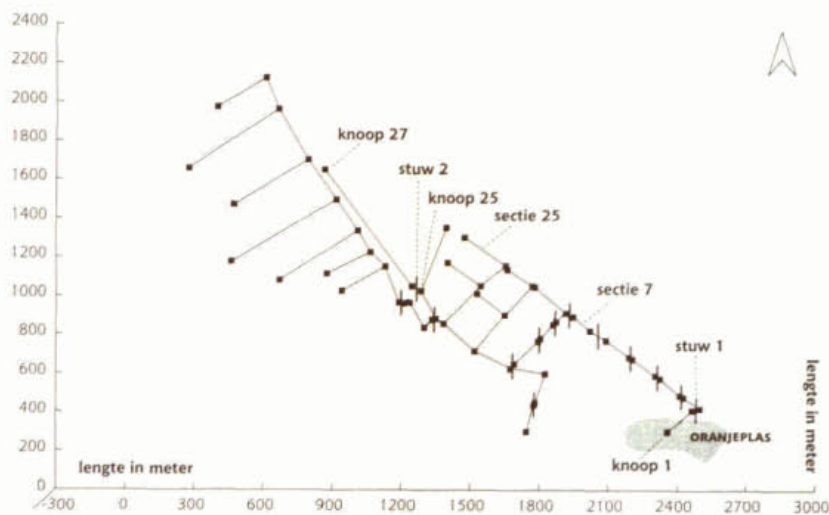
1.4 Voorbeeld Oranjeplas

1.4.1 Situatieschets

Onderstaand uitgewerkt voorbeeld is ontleend aan een praktijkgeval aangedragen door het Hoogheemraadschap van Delfland. De Oranjeplas is een waterpartij, die deels wordt gevoed door zoute kwel. Hierdoor is het chloridegehalte in de plas relatief hoog (ca. 300 mg/l). In tijden van grote neerslag stijgt het peil in de plas. Het maximaal toegestane peil bedraagt NAP +0,40 m. Onderzocht dient te worden in hoeverre het wateroverschot kan worden afgelaten naar de aangrenzende polder, waarbij met name de verspreiding van het chloriderijke water in de polder van belang is. Het achtergrond chloridegehalte in de polder is gelijk aan ca. 100 mg/l. De streefpeilen in de polder voor zomer en winter bedragen respectievelijk NAP -0,20 en -0,35 m. De polder watert via een stuw af op de boezem, waarvan het streefpeil gelijk is aan NAP -0,40 m. Afvoer van het water vanuit de plas naar de polder dient via een stuw te geschieden.

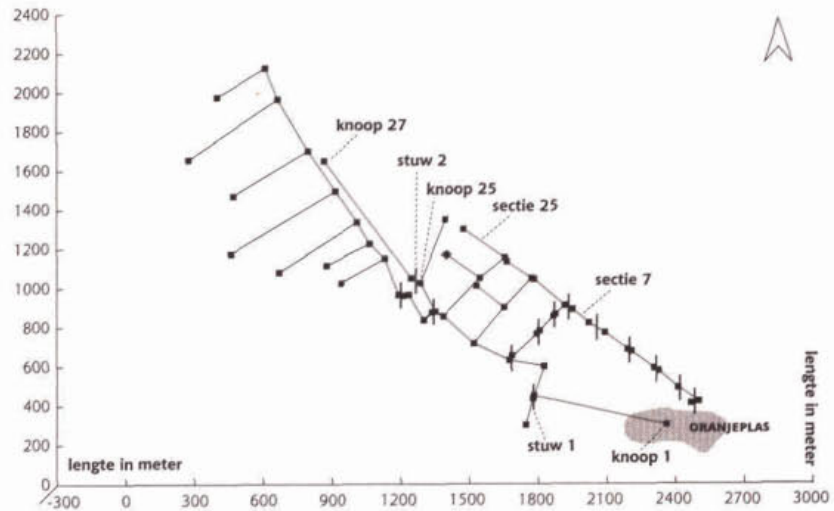
Er zijn simulaties uitgevoerd voor de zomer- en wintersituatie. Er zijn twee alternatieven voor de plaats van de stuw doorgerekend (zie figuur 1.2a en 1.2b). Eén waarbij de stuw is geplaatst in de noordoosthoek van de plas en afvoert op een relatief smalle watergang en een alternatief waarbij de stuw afvoert op een vrij brede watergang en in het zuidwesten van de plas is gelokaliseerd. Daarnaast is de capaciteit van de stuw gevarieerd door variatie van de breedte ervan. De invloed van neerslag is niet meegenomen bij de simulaties. Er wordt aangenomen dat na een natte periode het peil in de plas zodanig is gestegen, dat water moet worden afgelaten. De leegloop van de plas wordt met behulp van DUFLOW gesimuleerd. Tijdens de leegloop wordt aangenomen dat het peil in de polder gelijk is aan het streefpeil en dat tijdens de periode dat water uit de plas wordt afgelaten geen afvoer van neerslag op de polderwateren plaatsvindt. Eventueel kan het effect van neerslag worden gesimuleerd met het neerslag afvoer model RAM, dat direct te koppelen is aan DUFLOW.

Figuur 1.2a Schematisering polder. Alternatief 1, aflat van water vanuit de noordoosthoek van de plas.



Figuur 1.2b

Schematisering polder. Alternatief 2, aflat van water vanuit de zuidwesthoek van de plas.



1.4.2 DufLOW invoer

Hieronder wordt de DUFLOW invoer beschreven. Bij de beschrijving ervan is gebruik gemaakt van de namen van de DUFLOW invoerschermen. De invoerschermen zijn niet in de tekst opgenomen, daar alle invoerbestanden op diskette zijn bijgeleverd.

HET NETWORK

Het netwerk is geïmporteerd van de DOS-versie van de procesbeschrijving. Hiertoe is eerst een nieuw projectfile geopend. Via het 'file' menu verschijnt door het commando 'import' aan te klikken het 'import file' scherm. Het projectfile is vervolgens geopend, waardoor het gehele DOS-project in de DufLOW modellering studio wordt ingelezen. Onder 'network' is nu het netwerk beschikbaar gekomen. Hoewel het netwerk is geconverteerd, staan er overbodig geworden knopen in. Deze kunnen eventueel verwijderd worden door de betreffende knopen aan te klikken en op 'delete' te drukken.

De schematisering van de polder is gemaakt aan de hand van een leggerkaart (schaal 1:5000). Daar het gaat om een klein systeem, zijn vrijwel alle watergangen in de schematisering opgenomen. Een paar kleine doodlopende slootjes zijn niet in het model opgenomen. In het netwerk zijn een groot aantal duikers als CULVERT opgenomen, waarbij een aantal duikers in serie zijn samengevoegd tot een hydraulisch equivalente duiker. In het systeem bevinden zich twee stuwen, die als OVERFLOW zijn gemodelleerd. De plas is geschematiseerd als één sectie, die via een stuw (WE11) verbonden is met de polder. De tweede stuw in het systeem (WE12) vormt de verbinding tussen de polder en de boezem. Sectie 14 representeert de boezem, waarbij op knoop 27 een peilrand wordt opgelegd. Figuur 2.1 toont het geschematiseerde systeem.

KNOPEN

De x- en y-coördinaten van de knooppunten zijn afgelezen van de leggerkaart, waarbij zelf een oorsprong is gedefinieerd. Omdat in het model geen rekening wordt gehouden met de afvoer van neerslag zijn aan de schematisatie geen 'area points' aan de schematisatie toegevoegd, noch time series bij 'precipitation'.

SECTIES

Voor de lengte van de secties zijn de door DUFLOW uit de x- en y-coördinaten berekende waarden gebruikt. Voor sectie 1 (de plas) is een waarde ingevoerd van

650 m om de dimensie beter te benaderen. Het is van belang dat het bergend oppervlak overeenkomt met de werkelijkheid. De bodempeilen aan het begin en eind van elke sectie zijn berekend uit het winterpeil en de schouwdiepten zoals die in de leggerinformatie worden weergegeven.

DWARSDOORSNEDEN

Profielen zijn eveneens opgegeven op basis van de informatie in de legger. Op basis van de schouwbreedte en een verhouding van 1:3 tussen bodembreedte en breedte aan het oppervlak zijn de bodembreedtes berekend. Voor sectie 1 (de plas) is een breedte van 300 m ingevoerd om de dimensies in overeenstemming met de werkelijkheid te brengen. Met name het bergend oppervlak dient goed te worden opgegeven, daar dit de snelheid van leeglopen van de plas bepaalt.

KUNSTWERKEN

Informatie over de geometrie van de duikers en karakteristieke maten van de stuwen is eveneens afkomstig uit de legger. WE11, de stuw tussen plas en polders is zelf gedimensioneerd, waarbij verschillende waarden voor de breedte zijn gebruikt om de afvoercapaciteit te variëren.

INITIËLE CONDITIES

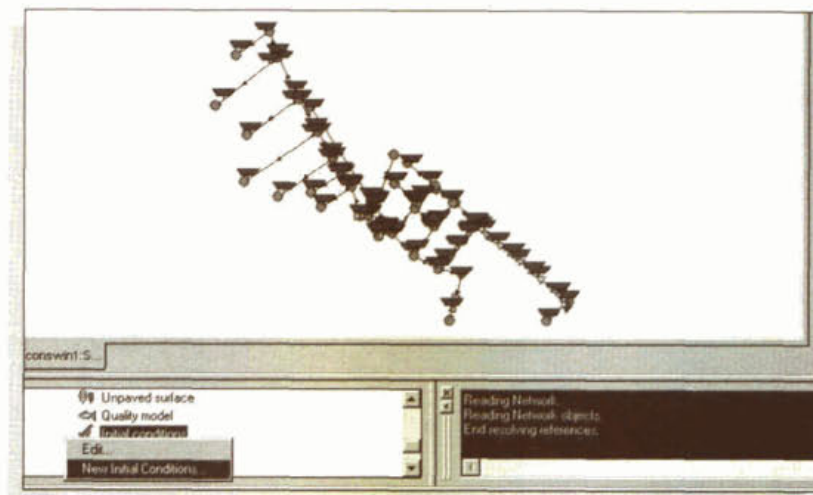
De initiële waterpeilen en debieten zijn bepaald met behulp van de optie 'new initial conditions'. Deze optie is na de uitvoering van een berekening te vinden door in de Scenario Manager met de rechtermuisknop op 'initial conditions' binnen het gewenste scenario te klikken (zie figuur 1.3).

De initiële waterpeilen, debieten en zoutconcentraties zijn ingevoerd via het 'edit' menu, commando 'object properties'. Via de duflow tab van elke knoop afzonderlijk of alle knopen tegelijk (bij gelijke initiële waarden) kunnen onder de optie 'initial conditions' deze gegevens ingevoerd worden.

Hiertoe is voor een situatie met een initieel waterpeil van NAP +0,42 m in de plas en van NAP -0,20 m (en NAP -0,35 m) in de polder een simulatie van alleen de waterbeweging uitgevoerd. De initiële debieten zijn voor deze berekeningen gelijk aan nul gekozen. Met 'new initial conditions' is vervolgens de toestand op het moment dat het waterpeil in de plas een waarde van NAP +0,40 m heeft bereikt, gekozen als initiële toestand voor de volgende simulatie. Zo wordt bereikt dat de initiële condities overeenstemmen met de randvoorwaarden en er geen grote schommelingen in waterpeilen en debieten meer optreden. Doet men dit niet dan treden gedurende de eerste uren door instabiliteiten grote fluctuaties op in debiet en waterpeilen. In de meeste gevallen zullen deze schommelingen snel uitdempen en niet tot problemen leiden voor de berekening van de waterbeweging.

Figuur 1.3

Het gebruik van de optie 'new initial conditions'



Voor kwaliteitsberekeningen is echter de ervaring dat dit kan leiden tot instabiliteiten, die wel doorwerken in de vervolgberekeningen. Bijvoorbeeld door het optreden van negatieve concentraties in de beginfase van de simulatie. Afhankelijk van de processen, die men in het model beschrijft, kan dit leiden tot instabiliteiten en onrealistische uitkomsten.

Aangenomen wordt dat overal in de polder de initiële chlorideconcentratie gelijk is aan 100 mg/l en dat in de plas de concentratie 300 mg/l bedraagt. Daar de plas wordt beschouwd als een bak, die leegloopt, betekent dit overigens dat wordt verondersteld dat het chloridegehalte in de plas constant blijft.

RANDVOORWAARDEN

In dit model wordt slechts één randvoorwaarde met betrekking tot kwantiteit opgelegd. Op knoop 27 is een constant peil van NAP -0.40 m opgelegd. Dit peil is gelijk aan het boezempeil, dat constant wordt verondersteld. Daar de plas wordt beschouwd als een bak die leegloopt, hoeft hier geen randvoorwaarde te worden opgelegd. Aangezien er geen lozingen op het systeem plaatsvinden en er verder geen uitwisseling met de omgeving is hoeven er verder geen randvoorwaarden te worden gedefinieerd.

Voor elke randvoorwaarde met betrekking tot kwantiteit moet men ook een randvoorwaarde voor de kwaliteit opleggen. Dit betekent dat aan elke lozing of andere toevoer een kwaliteit moet worden toegekend. In dit voorbeeld zijn er geen lozingen. De enige randvoorwaarde is de peilrand op de benedenstrooms gelegen knoop 27.

EXTERNE VARIABELEN

Op de dispersieconstante na zijn er in dit model geen tijd- en plaatsafhankelijke invoergrootheden. Voor de dispersieconstante wordt onderscheid gemaakt tussen de kleine sloten en de grotere watergangen. Voor de sloten wordt gerekend met een dispersieconstante van 1 m²/s, voor de overige watergangen is een waarde van 5 m²/s gebruikt.

De waarden voor de dispersieconstanten zijn weergegeven in zogenaamde schema's. In een schema worden de eigenschappen van een externe variabele, vastgelegd. Om een schema aan een externe variabele toe te voegen dient in het 'scenario' menu gekozen te worden voor het commando 'external variables'. Door in het 'edit' menu via 'object properties' een knoop, dwarsdoorsnede of kunstwerk te selecteren en vervolgens 'external variables' onder de 'duflow' tab te kiezen kan een schema geselecteerd worden en worden de in het schema beschreven eigenschappen verbonden aan het netwerk object.

In dit voorbeeld zijn twee schema's beschikbaar voor de dispersieconstante, Ext_d_1 en Ext_d_2. Ext_d_1 heeft een waarde van 1 m².sec⁻¹ en is geselecteerd voor de sloten, Ext_d_2 heeft een waarde van 5 m².sec⁻¹.

PARAMETERS

In het model voor een conservatieve stof zijn geen parameters gedefinieerd.

CALCULATION SETTINGS

De duur van de simulatieperiode is twee weken. Er wordt een tijdstap gebruikt van 10 min, zowel voor de kwantiteit en de kwaliteit. De uitvoer wordt om de 30 min bewaard. Als advectionsterm is gekozen voor 'damped', aan te klikken in het 'calculation settings' scherm, dat te bereiken is via het 'scenario'-menu. Proefondervindelijk is voor dit netwerk vastgesteld dat dit leidt tot stabielere uitkomsten voor de waterbeweging. Bij het gebruik van deze optie wordt de Froude-term in de impulsbalans wel meegenomen, maar wordt de absolute waarde niet groter dan de wrijvingsterm. Indien er plotselinge veranderingen in de dwarsdoorsnede zijn, kan het meenemen van de Froude term leiden tot instabiliteiten.

1.4.3 Resultaten

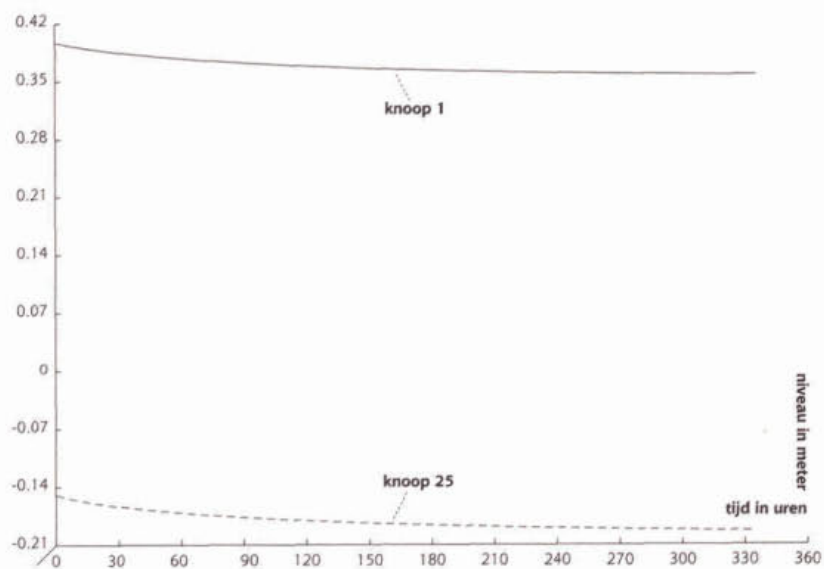
Figuur 1.4 toont het verloop van het waterpeil voor de zomersituatie voor het alternatief, waarbij de stuw in de noordoosthoek van de plas wordt gelokaliseerd. Knoop 1 ligt in de plas en knoop 25 is vlak voor de stuw waar het water de polder verlaat. Na 14 dagen is het waterpeil in de plas gezakt tot ca. NAP +0,35 m, gelijk aan het peil van de stuw. Het peil in de polder is aan het eind van de simulatieperiode gelijk aan NAP -0,20 m. De waterpeilen in de polder zijn vrijwel overal gelijk. Het maximale verschil is ca. 2 cm. Figuur 1.5 toont het bijbehorende verloop van de chlorideconcentratie in een tweetal secties. Sectie 7 ligt in de noordelijke watergang, waarlangs voor dit alternatief het water wordt afgevoerd. Het chloridegehalte in deze sectie neemt snel toe en na ca. 2 dagen is de maximale concentratie van 300 mg/l bereikt. Sectie 25 is een doodlopende poldersloot, die niet direct door het water uit de plas wordt beïnvloed. Eerst na geruime tijd neemt de concentratie toe en na 14 dagen wordt hier een chloridegehalte van ca. 220 mg/l bereikt. Daarna zal het chloridegehalte nog slechts langzaam blijven stijgen, omdat de waterpeilen overal in de polder gelijk zijn en het advectief transport te verwaarlozen is.

In figuur 1.6 is het verloop van de chlorideconcentratie weergegeven voor het tweede alternatief, waarbij het water vanuit de zuidwesthoek van de plas wordt afgelaten op de polder. In dit geval beïnvloedt het chloriderijke water sectie 7 in veel mindere mate. Het water wordt direct via de zuidelijke tak van de polder afgevoerd. In sectie 25 wordt na 14 dagen eveneens een chloridegehalte van ca. 220 mg/l bereikt. De concentratie is iets sneller toegenomen in vergelijking met alternatief 1.

Figuur 1.7 toont het effect van de variatie van de stuwbreedte voor de situatie, waarbij het water in de noordoosthoek wordt afgelaten. Er is gerekend met respectievelijk een breedte van 0,5 m en 2,5 m. Bij de simulatie met een stuwbreedte van 2,5 m wordt het water veel sneller afgevoerd, hetgeen leidt tot een veel snellere toename van het chloride gehalte in sectie 19. Bij een stuw van slechts 0,5 m breedte zijn de waterpeilen na 14 dagen nog niet zijn teruggekeerd op het streefpeil, waardoor de concentratie chloride ook aan het einde van de simulatieperiode nog sterk blijft toenemen.

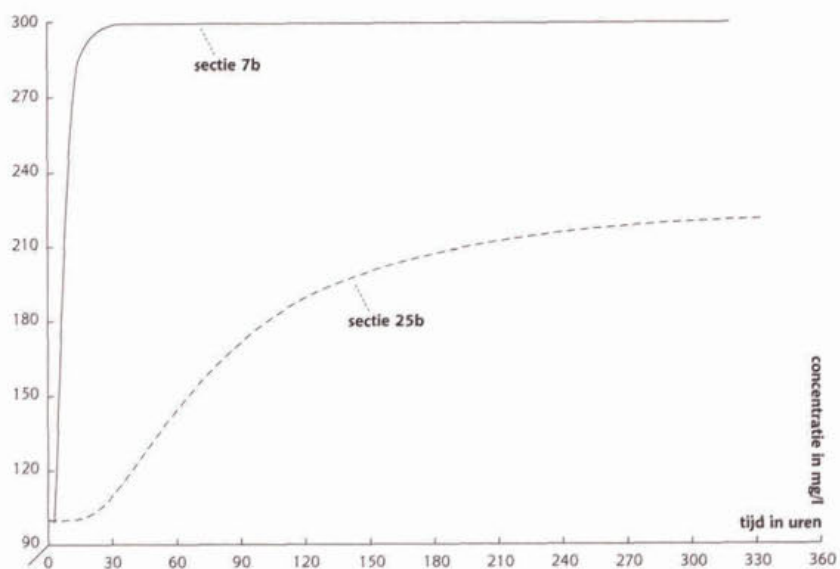
Figuur 1.4

Waterpeil in knoop 1 en 25. Alternatief 1, aflat water vanuit de noordoosthoek van de plas, bij een breedte van de stuw van 1,5 m.



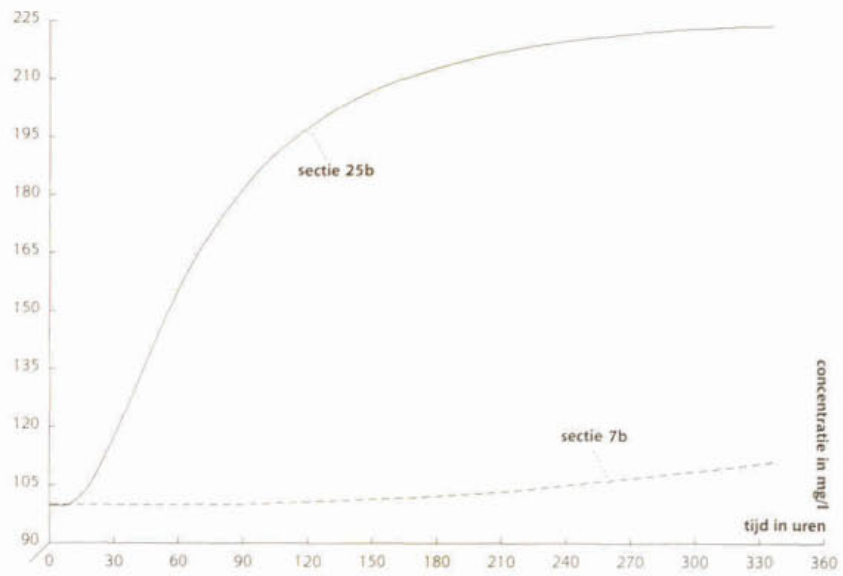
Figuur 1.5

Chloridegehalte in sectie 7 en 25. Alternatief 1, aflat water vanuit de noordoosthoek van de plas.



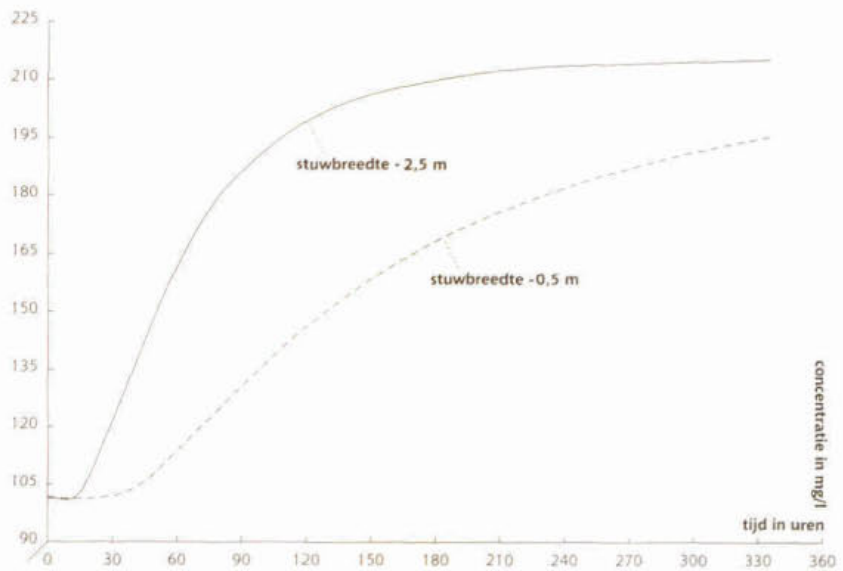
Figuur 1.6

Chloridegehalte in sectie 7 en 25. Alternatief 2, afluut water vanuit de zuidwesthoek van de plas,



Figuur 1.7

Chloridegehalte in sectie 19. Alternatief 1, afluut van water vanuit de noordoosthoek van de plas bij een stuwbreedte van respectievelijk 0,5 en 2,5 m.



Literatuur

Abbink Spaink. 1995. Validatie van TOXSWA. Afstudeerverslag LUW- vakgroep WKAO rapport no. 027/95. Wageningen.

Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J. and Brooks, N.H. 1979. Mixing in inland and coastal waters. Academic Press, New York.

Heer, H. de. 1979. Measurements and computations on the behaviour of the insecticides azinphos-methyl and dimethoate in ditches. PUDOC, Wageningen.

STOWA, 1998. Duflow for Windows, Stowarapport 98-19

Thoman, R.V. and Mueller, J.A. 1987. Principles of Surface Water Quality Modelling and Control. Harper & Row, Publishers, New York.

■ Bijlage 1

**Procesbeschrijvingen Conservatieve stof
(ZOUT.MOD)**

```
/* MODEL VOOR EEN CONSERVATIEVE STOF          */
/*                                               */
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
/*                                               */
/* Landbouwniversiteit Wageningen              */
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
/* Postbus 8080                                */
/* 6700 DD Wageningen                          */
```

```
WATER Cl      [0.00] mg/l ; Chlorideconcentratie
{
}
```

■ Bijlage 2

**Overzicht van de DUFLOW bestanden en
doorgerekende alternatieven**

DUFLOW project	Scenario	Aflaat water	Breedte stuw (m)	Streefpeil polder (m NAP)
winter	winter1	noordoost	1,5	-0,35
zomer	zomer1	noordoost	1,5	-0,20
zomer	zomer1a	noordoost	0,5	-0,20
zomer	zomer1b	noordoost	2,5	-0,20
winter	winter2	zuidwest	1,5	-0,35
zomer	zomer2	zuidwest	1,5	-0,20

**Enige waarden voor de dispersiecoëfficiënt
in een aantal rivieren en beken**

Stroom	Diepte (m)	Breedte (m)	R (m)	Afvoer (m ³ /s)	U (m/s)	D (m ² /s)
Hupselse Beek	0,5	2,0	0,3	0,06	0,06	0,04
Groenlose Slinge	1,0	9,8	0,8	0,49	0,05	0,09
Oude IJssel	4,0	40,0	3,3	33,00	0,21	2,67
Chicago Ship Canal	8,0	48,8	6,0			3,00
Monocay River	0,3	35,0	0,3	2,40	0,21	4,70
	0,4	36,5	0,4	5,20	0,32	13,90
	0,9	47,6	0,8	18,40	0,44	37,20
Green-Duwamish River	1,1	20,0	1,0			8,50
Concite River	0,3	12,5	0,2	1,00	0,31	7,00
	0,4	15,9	0,4	2,40	0,37	13,90
Clinch River	0,6	36,0	0,6	6,80	0,33	8,10
	0,8	47,0	0,8	9,20	0,23	14,00
	2,1	53,0	1,9	51,00	0,46	47,00
	2,1	60,0	2,0	85,00	0,67	54,00
Antietam Creek	0,3	15,9	0,3	2,00	0,43	9,30
	0,5	19,8	0,5	4,40	0,43	16,30
	0,7	24,4	0,7	8,90	0,51	25,60
Elkhorn River	0,3	33,0	0,3	4,30	0,43	9,30
	0,4	50,9	0,4	10,00	0,47	20,90
Powell River	0,9	34,0	0,8	4,00	0,14	9,50
Copper Creek	0,5	16,0	0,5	1,50	0,19	9,50
	0,4	19,0	0,4	13,70	1,80	
	0,5	16,0	0,5	1,50	0,19	20,00
	0,9	18,0	0,8	8,50	0,56	21,00
Coachella Canal	1,6	24,0	1,4	26,90	0,72	9,60
Bayou Anacoco	0,4	19,8	0,4	2,40	0,29	13,90
	0,9	25,9	0,9	8,20	0,34	32,50
	0,9	36,6	0,9	13,50	0,40	39,50
	0,8	13,4	0,7	4,00	0,37	13,90
Muddy Creek	1,2	19,5	1,1	10,60	0,45	32,50
John Day	0,6	24,0	0,5	14,20	1,06	13,90
	2,5	34,0	2,1	69,00	0,82	65,00
Amite River	0,8	36,6	0,8	8,60	0,29	23,20
	0,8	42,4	0,8	14,20	0,42	30,20
Manawatu River	1,0	25,0	0,9	26,00	1,04	45,00
White River	0,6	67,0	0,5	12,80	0,35	30,20
Chatthochee River	1,1	65,5	1,1	30,00	0,41	32,50
Waikato River	2,5	100,0	2,4	160,00	0,64	50,00

Enige waarden voor de dispersiecoëfficiënt
in een aantal rivieren en beken (vervolg)

Stroom	Diepte (m)	Breedte (m)	R (m)	Afvoer (m ³ /s)	U (m/s)	D (m ² /s)
Nooksack River	0,8	64,0	0,7	33,00	0,68	34,90
	2,9	86,0	2,7	300,00	1,19	153,40
Sabine River	1,0	35,0	0,9	7,40	0,21	39,50
	2,0	104,0	2,0	119,00	0,56	316,00
	4,8	127,0	4,4	389,00	0,64	670,00
Wind/Bighorn River	1,0	67,0	1,0	58,00	0,88	41,90
	2,2	68,6	2,0	231,00	1,55	163,00
Susquehana River	1,4	203,0	1,3	106,00	0,39	92,20
Tadkin	2,3	70,0	2,2	71,00	0,44	112,00
	3,9	72,0	3,5	213,00	0,77	260,00
Mississippi				10310,00		232,00
				22600,00		700,00
Missouri River	2,2	183,0	2,2	380,00	0,93	465,00
	3,6	201,0	3,4	913,00	1,28	837,00
	3,1	197,0	3,0	935,00	1,53	892,00

■ Bijlage 3b

**Enige waarden voor de dispersieconstante
in sloten en langzaamstromende systemen
(de Heer 1979)**

Stroomsnelheid U (m/s)	Diepte (m)	Dispersie D (m ² /s)
0,046	0,16	0,19
0,048	0,21	0,05
0,050	1,00	0,083
0,053	0,18	0,21
0,055	0,5	0,04
0,065	0,15	0,07
0,069	4	1,66
0,20	0,3	0,16

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

hoofdstuk

Eerste orde afbraak

2

juli 1996

R.H. Aalderink

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

Inhoudsopgave

2.1 Eerste orde afbraak 5

2.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5

2.1.2 Stationaire analyse 5

2.1.3 Dynamische benadering 8

2.2 Procesbeschrijvingen 10

2.3 Benodigde invoer 10

2.4 Voorbeeld stadswater 11

2.4.1 Situatieschets 11

2.4.2 Dufflow invoer 12

2.4.3 Resultaten 14

Literatuur 15

Bijlagen

Bijlage 1 *Procesbeschrijvingen eerste orde afbraak (DECAY.MOD)* 16

2.1 Eerste orde afbraak

In hoofdstuk 1 is het eenvoudige model voor het transport van een conservatieve stof beschreven. Dat model is alleen toepasbaar voor verontreinigingen, die in het geheel niet onderhevig zijn aan afbraak. In dit hoofdstuk wordt een model beschreven waarmee het gedrag van een stof die wel afbreekbaar is kan worden gesimuleerd. Ook dit model is zeer eenvoudig. Er wordt verondersteld dat de stof volgens een eerste orde kinetiek wordt verwijderd uit de waterkolom. Daarnaast bevat het model een bronterm. Sediment/water uitwisseling wordt in dit model niet dynamisch beschreven.

De differentiaalvergelijking, waarmee de concentratie wordt berekend, wordt gegeven door:

$$[1] \quad \frac{dC}{dt} = -k_d C + \frac{S_d}{Z}$$

waarin:

- C concentratie van de stof ($\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)
- k_d eerste orde snelheidsconstante voor de verwijdering (dag^{-1})
- S_d bronterm ($\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{dag}^{-1}$)
- Z waterdiepte (m)

Het rechter lid van vgl.1 beschrijft alleen het effect van de processen (verwijdering en bron) op de concentratie. De advectie- en dispersieterm zijn hier niet weergegeven. Deze worden standaard door DUFLOW berekend. Zoals in hoofdstuk 1 is weergegeven worden de beschrijvingen van de processen, zoals in dit geval weergegeven in vgl.1, tijdens de berekening automatisch gekoppeld aan de transportvergelijking.

2.1.1 Toepassingsmogelijkheden

Het model beschrijft het gedrag van één enkele verontreiniging onderhevig aan afbraak. De interacties met andere verontreinigingen worden niet gesimuleerd. Ook de invloed van omgevingscondities wordt in dit model niet meegenomen. Het gaat om een eenvoudig model, dat in principe bedoeld is voor een eerste globale analyse van een systeem. Het model kan voor een groot aantal verschillende verontreinigingen worden toegepast. Vergelijking 1 wordt in de praktijk zowel voor stationaire als dynamische analyse van watersystemen gebruikt. Beide toepassingen worden besproken en geïllustreerd aan de hand van een voorbeeld, waarbij een dynamische toepassing als uitgewerkt voorbeeld in DUFLOW wordt gepresenteerd.

2.1.2 Stationaire analyse

Toepassingen van dit model worden in de praktijk vooral gebruikt voor het beschrijven van stationaire systemen. Dat wil zeggen dat de concentratie van de verontreiniging constant is in de tijd. In dat geval heerst er evenwicht tussen de aanvoer en productie enerzijds en afbraak en afvoer anderzijds. Een dergelijke benadering wordt bijvoorbeeld toegepast voor het gedrag van stikstof of fosfaat. Uitgaande van een constante of zomergemiddelde belasting van het systeem en een stationaire waterbeweging kan in dat geval een stationaire of zomergemiddelde concentratie worden voorspeld. De snelheidsconstante k_d is in dat geval een parameter, die het netto effect van de verwij-

deringsprocessen in de waterkolom en de nalevering vanuit het sediment beschrijft. Veelal wordt in dergelijke modellen gewerkt met een netto verwijderingssnelheid V_d (m.dag^{-1}) en wordt k_d gegeven door:

$$[2] \quad k_d = \frac{V_d}{Z}$$

waarin Z de waterdiepte is. De diffuse belasting kan in dat geval worden beschreven met de bronterm S_d uit vergelijking 1.

Voor de simulatie van de processen in de fosfaathuishouding zijn uiteraard ook complexe procesbeschrijvingen voorhanden. Zie bijvoorbeeld de modellen EUTROF1 en EUTROF2, waarin de fosfaat- en stikstofkringloop in detail wordt beschreven. Zeker in het geval dat er geen gedetailleerde informatie beschikbaar is om op een verantwoorde wijze alle parameters in de meer complexe modellen een waarde te geven, kan met dit eenvoudige model een eerste indruk worden verkregen van de gemiddelde concentraties. Ook voor simulatie van het gedrag van zware metalen en organische microverontreinigingen worden stationaire modellen gebruikt voor een eerste analyse.

Voor een ideaal gemengd systeem, dat wordt doorspoeld met een constant debiet Q_d kan vergelijking 1 worden uitgebreid tot:

$$[3] \quad \frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_i - C) - k_d C + \frac{S_d}{Z} + \frac{M_i}{V}$$

Waarin:
 C_i de concentratie in het doorspoelwater (g.m^{-3})
 V het volume (m^3)
 τ de verblijftijd, gelijk aan V/Q (dag)
 M_i een eventuele puntlozing op het systeem (g.dag^{-1})

Uitgaande van een stationaire toestand volgt uit vergelijking 3 voor de evenwichtsconcentratie:

$$[4] \quad C = \frac{\frac{1}{\tau} C_i + \frac{S_d}{Z} + \frac{M_i}{V}}{\frac{1}{\tau} + k_d}$$

Een probleem bij de toepassing van deze stationaire modellen is de grote spreiding in de waarde van de parameter k_d . Daar deze parameter een resultante is van verschillende processen, is de waarde hiervan nogal afhankelijk van het systeem. Tabel 2.1 geeft ter illustratie een aantal waarden van V_d voor stikstof en fosfaat voor een aantal Nederlandse meren.

Tabel 2.1 Netto verliesnelheid van stikstof en fosfaat voor een aantal Nederlandse meren.
(Overgenomen uit van Straten, 1986)

Systeem	v_d Fosfaat (m.dag ⁻¹)	v_d Stikstof (m.dag ⁻¹)
Sloterplas	0,004	
Langeraaarse plassen	0,005	0,004
Westeinder plassen	0,005	0,006
Nieuwkoopse plassen	0,006	0,004
Loosdrechtse plassen	0,007	
Wolderwijd	0,008	0,007
Vinkeveense plassen	0,010	
Zuidlaardermeer	0,011	0,012
Waalboezem	0,013	0,010
Reeuwijkse plassen	0,014	0,006
Braasemermeer	0,028	0,019
Schildmeer	0,036	0,078
Kagerplassen	0,042	0,027
Mooie Nel-Spaarne	0,193	0,118

Ook voor niet ideaal gemengde lijnvormige systemen kan een dergelijke stationaire analyse worden uitgevoerd. In dat geval moet een oplossing worden gevonden van de totale stoftransportvergelijking. Vgl. 1 wordt dan uitgebreid met een advection- en dispersieterm. Voor constante stroomsnelheid, doorstroomde oppervlak en dispersieconstante geldt dan:

$$[5] \quad \frac{dC}{dt} = -u \frac{dC}{dx} + D \frac{d^2C}{dx^2} - k_d C + \frac{S_d}{Z}$$

waarin: D dispersieconstante (m².dag⁻¹)
 u stroomsnelheid (m.dag⁻¹)

Voor systemen waarin de dispersie mag worden verwaarloosd luidt de oplossing voor de evenwichtsconcentratie:

$$[6] \quad C = \frac{S_d}{k_d Z} [1 - e^{-\frac{k_d x}{u}}] + C_0 e^{-\frac{k_d x}{u}}$$

waarbij C_0 gelijk is aan de concentratie op $x=0$. vergelijking 6 kan worden toegepast over een traject van een stromend systeem. Als $x=0$ wordt veelal het lozingspunt gekozen, waarbij de beginconcentratie C_0 kan worden berekend door een massabalans op te stellen op het lozingspunt. Door volledige menging aan te nemen van de lozing en het water bovenstreams het lozingspunt kan op deze wijze een schatting van C_0 worden verkregen.

Indien dispersie niet mag worden verwaarloosd wordt de analytische oplossing ingewikkelder, maar is nog steeds bruikbaar voor een eerste globale analyse van een stationair systeem. De oplossingen worden hier niet gegeven, omdat er verschillende oplossingen zijn afhankelijk van de belasting van het systeem. Het voert te ver deze allemaal in het kader van deze handleiding weer te geven. Thomann and Mueller

(1987) geven analytische oplossingen van vergelijking 5 voor verschillende belastings-scenario's.

Ook voor stromende systemen geldt dat de parameters van het model veelal systeem specifiek zijn en door kalibratie moeten worden vastgesteld. Dit kan bijvoorbeeld door bepaling van de concentratie als functie van de afstand benedenstrooms van het lozingspunt. Indien de belasting, stroomsnelheid en dispersieconstante bekend zijn kan dan de waarde van k_d worden bepaald.

Een ander probleem is dat de waarde van de parameters verandert na het nemen van beheersmaatregelen. Bekend is bijvoorbeeld dat de waarde van V_d voor fosfaat afneemt na reductie van de externe belasting. Dit maakt de voorspellende waarde van deze stationaire benadering gering. De betekenis van deze modellen moet dan ook vooral worden gezocht in de analyse van systemen. Om een schatting van de systeem specifieke waarde van de parameters te krijgen zijn nauwkeurige schattingen nodig van met name de externe belasting van het systeem.

Daar DUFLOW een dynamisch model is, is toepassing van de hierboven beschreven stationaire benaderingen voor veel systemen nogal overdreven. Veelal kan worden volstaan met de analytische oplossingen van vergelijking 3 of 5 om de stationaire concentraties te berekenen. Echter voor systemen met een complexe geometrie en/of lokaal verschillende belasting, bijvoorbeeld een ingewikkeld netwerk van poldersloten of boezemwateren, kan toepassing van DUFLOW toch handig zijn om een indruk te krijgen van de stationaire concentratieverdeling in het systeem. In dat geval simuleert men het systeem tot een stationaire concentratieverdeling is bereikt.

2.1.3 Dynamische benaderingen

Dynamische toepassingen van het model liggen, gezien het feit dat DUFLOW een dynamische model is, meer voor de hand. Toepassingen worden dan gevonden in het beschrijven van het gedrag van een systeem na een kort durende puntlozing of na lozingen met een in de tijd variërende vracht.

Ter illustratie wordt in dit hoofdstuk het effect van een overstorting uit een gemengd rioolstelsel op de concentratie in het ontvangende water van indicatoren voor pathogene micro-organismen uitgewerkt.

De verwijdering van bacteriën uit de waterkolom geschiedt door sedimentatie en afsterving. Met name bij overstortingen uit gemengde rioolstelsels kunnen grote hoeveelheden slib uit het rioolstelsel worden geloosd. De micro-organismen zijn voor een deel gehecht aan gesuspendeerd materiaal of worden ingevangen tijdens coagulatie en flocculatieprocessen en zijn als zodanig onderhevig aan sedimentatie. In de periode kort na een overstorting is de sedimentatie het belangrijkste proces voor de verwijdering van bacteriën uit de waterkolom. Het goed sedimenteerbare materiaal wordt echter snel uit de waterkolom verwijderd en na ca. één dag neemt de sedimentatiesnelheid sterk af. De afsterving van micro-organismen hangt op een complexe wijze af van een groot aantal factoren en is soort specifiek. Zo spelen ondermeer de temperatuur, de instraling, het zuurstofgehalte en de saliniteit een belangrijke rol. In dit eenvoudige model wordt echter gewerkt met een constante afsterfsnelheid.

Door sedimentatie en afsterving neemt de concentratie aan bacteriën af. Het is echter gebleken, dat de concentratie nooit helemaal naar nul daalt. Ook in de achtergrondsituatie (geruime tijd na een overstorting) worden nog indicatororganismen gevonden. Dit kan worden verklaard door een permanente nalevering van organismen

uit het sediment.

Daar het sediment na een overstorting sterk wordt belast met bacteriën, en de afsterfsnelheid van bacteriën in het sediment vele malen kleiner is dan in de waterkolom, is het sediment van oppervlaktewater dat lozingen uit gemengde rioolstelsels ontvangt continu verontreinigd met bacteriën. Zo vormt het sediment een continue belasting voor het oppervlaktewater door nalevering van organismen. Ook door diffuse belasting ten gevolge van afspoeling en uitwerpselen van watervogels zijn er in de achtergrondsituatie altijd bacteriën in het water te vinden.

In het model wordt de totale verwijdering door sedimentatie en afsterving beschreven door de somparameter k_d . De bronterm S_d representeert de totale diffuse belasting ten gevolge van nalevering uit het sediment, afspoeling en belasting door watervogels.

Tabel 2.2 geeft enige typische waarden voor de parameters van het model voor een aantal verschillende indicatororganismen. De waarden zijn ontleend aan een onderzoek in een bergingsvijver, die overstortwater ontvangt uit het gemengde rioolstelsel van Loenen (Aalderink et al., 1986).

Tabel 2.2 Parameters k_d en S_d voor de toepassing t.b.v. de beschrijving van het gedrag van indicatororganismen na een overstorting uit een gemengd rioolstelsel (Ontleend aan Aalderink et. al, 1986).

Indicatororganisme	k_d dag ⁻¹	Achtergrond-concentratie ¹⁰ log(N/100 ml)	S_d N.m ⁻² .dag ⁻¹
E. Coli	0,4-0,5	2,0	9 x 10 ⁵
Thermotolerante Coli	0,4-0,5	1,0-2,7	4 x 10 ⁶
Faecale Streptococcon	0,5-0,6	1,2-3,2	9 x 10 ⁶
Colifagen	0,2-0,3	0,3-0,7	1 x 10 ⁴

Opgemerkt moet worden dat met name de waarden voor S_d systeemspecifiek zijn en af kunnen hangen van de lokale omstandigheden, zoals afspoeling, belasting met watervogels. De waarden voor S_d in tabel 2.2 zijn berekend op basis van de achtergrondconcentratie en k_d met behulp van:

$$[6] \quad \frac{S_d}{Z} = (k_d + \frac{1}{\tau}) C_a$$

waarin: C_a de achtergrondconcentratie (¹⁰log N/100 ml)
 τ de verblijftijd in de overstortvijver (dag⁻¹)
 Z de waterdiepte (m)

De vijver in Loenen wordt doorgespoeld met kwelwater en de verblijftijd in de achtergrondsituatie is ca 2,5 dag. De diepte ca. 1,0 m.

Typische gehalten aan indicatororganismen in overstortwater worden weergegeven in tabel 2.3.

Tabel 2.3 Gehalten aan verschillende indicatororganismen in overstortwater. Resultaten van vier overstortingen uit het gemengde rioolstelsel van Loenen (Overgenomen uit Aalderink et al, 1986).

Indicatororganisme	Range gemiddelde concentratie per gebeurtenis $^{10}\log(N/100 \text{ ml})$
E. Coli	5,9 - 7,2
Faecale Coli	7,1 - 7,2
Thermotolerante Coli	5,5 - 7,3
Faecale Streptococcon	5,7 - 5,9
Colifagen	3,4 - 5,0

2.2 Procesbeschrijvingen

De processen zijn hierboven reeds uitgebreid beschreven. Het bestand met de set procesbeschrijvingen wordt weergegeven in Bijlage 1.

2.3 Benodigde invoer

Tabel 2.4 geeft een algemeen overzicht van de benodigde invoer voor het model. Voor de initiële condities en randvoorwaarden, wordt verwezen naar hoofdstuk 1 (paragraaf 1.3.1 en 1.3.2), waarin het model voor een conservatieve stof wordt beschreven. Evenals voor een conservatieve stof wordt in dit model slecht één enkelvoudige verontreiniging gesimuleerd.

Tabel 2.4. Benodigde invoer model eerste orde afbraak

Type	Naam	Bron
Initiële conditie	Concentratie waterkolom	meting inleidende simulatie
Randvoorwaarden	Concentratie systeemrand Concentratie puntlozingen	meting
Parameters	k_d snelheidsconstante afbraak S_d bronterm	literatuur/kalibratie meting
Externe variabelen	D dispersieconstante	experimenteel literatuur

Het model kent twee parameters, die in paragraaf 2.1 reeds uitvoerig zijn beschreven. De afbraakconstante is veelal systeemspecifiek en hangt uiteraard ook af van de verontreiniging, die wordt gesimuleerd. S_d , de diffuse belasting, wordt in dit model ook als een parameter opgevat en dient ook per systeem te worden bepaald.

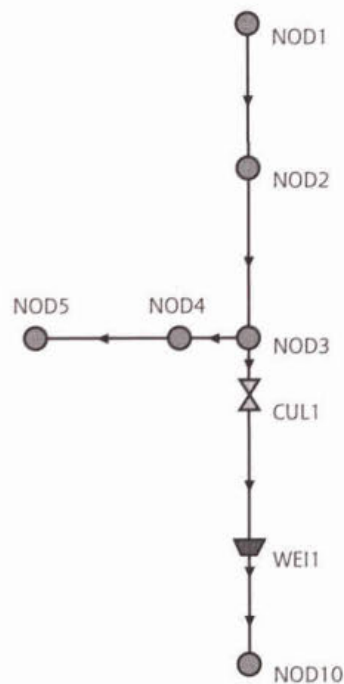
Behalve de dispersieconstante worden in dit model geen externe variabelen gebruikt. Voor een overzicht van typische waarden voor de dispersieconstante wordt eveneens verwezen naar hoofdstuk 1 (paragraaf 1.3.4).

2.4 Voorbeeld stadswater

2.4.1 Situatieschets

Het uitgewerkte voorbeeld is een hypothetische case, die echter wel ontleend is aan de praktijk. Het in dit hoofdstuk beschreven model wordt toegepast voor een stadswater, waarop een overstorting uit een gemengd rioelstelsel plaatsvindt. Een situatie, die veel voorkomt, daar veel vijvers en singels in het stedelijk gebied overstortwater ontvangen. De situatie is weergegeven in figuur 2.1. Het systeem maakt deel uit van een aaneenschakeling van semi stagnante vijvers. Het deel van het systeem dat wordt gesimuleerd bestaat uit een tweetal langwerpige waterpartijen, die verbonden worden door een duiker. De breedte varieert van 20 tot 22 m. Halverwege de hoofdwatergang bevindt zich een zijtak met een breedte van 16 m. De waterdiepte in het systeem varieert van 1,46 tot 1,85 m. Benedenstrooms bevindt zich een stuw. Het systeem wordt doorgespoeld met een debiet van $0,1 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Op het kopse eind van de zijtak zit de overstort.

Figuur 2.1 Schematisering van het systeem



2.4.2 DUFLOW invoer

CALCULATION SETTINGS

Er wordt gerekend met een tijdstap voor de waterbeweging van 30 min. De tijdstap voor de simulatie van de kwaliteit is 60 min. De totale duur van de simulatie is 20 dagen. Het uitvoerinterval is eveneens 1 uur en voor alle secties wordt de uitvoer weergegeven. Alle kwaliteitsvariabelen worden uitgevoerd. Hiervoor zijn via het 'scenario' menu, commando 'calculation settings' optie 'output variables' alle kwaliteitsvariabelen aangevinkt. Inclusief een tweetal functies, die speciaal voor dit voorbeeld zijn gedefinieerd. N is het aantal bacteriën per 100 ml. LogN is de $^{10}\log(N)$. Beide eenheden worden meestal gebruikt om bacteriegehalten uit te drukken. De functies kan men definiëren door in het bestand DECAY.MOD, de volgende regels toe te voegen:

$N = C/10000$;

$\text{LogN} = \text{LOG}(N)$;

Dit kan in het menu 'scenario', optie 'edit' via edit 'quality model'. Na toevoegen van de regels dient men het programma opnieuw te vertalen met de optie 'compile', in hetzelfde menu. Om beide functies ook uit te voeren, moeten deze in het menu 'scenario', via order 'calculation settings' met optie 'output variables' in de DUFLOW tab worden geselecteerd.

HET NETWERK

Het netwerk waarmee het stadswater is geschematiseerd, is in DUFLOW voor WINDOWS opgezet. Allereerst is een nieuw projectfile gedefinieerd, en zijn in het werkveld van de Netwerk Editor de knopen neergelegd, door het symbool voor knoop in de Netwerk Editor te selecteren. Vervolgens zijn aan de knopen kenmerken toegevoegd zoals coördinaten, randvoorwaarden, initiële waarden en externe variabelen met behulp van het commando 'object properties' in het 'edit' menu. De knopen zijn verbonden door secties toe te voegen. Tussen knoop 3 en 10 zijn een stuw en een duiker neergelegd. Wederom met behulp van het commando 'object properties' zijn deze kunstwerken gekarakteriseerd. Aan de secties zijn vervolgens 'cross sections' toegevoegd. De profielbeschrijvingen van de dwarsdoorsneden zijn vastgelegd in schema's. De schema's zijn vervolgens aan de dwarsdoorsneden toegekend via het Edit menu, commando 'object properties'. In figuur 2.1 is de op deze wijze verkregen schematisering van het stadswater weergegeven. Voor de duidelijkheid zijn de dwarsdoorsneden niet afgebeeld en zijn de knopen genummerd. In het netwerk kunnen elementen worden verborgen met behulp van de optie 'show objects', wanneer met de rechtermuisknop ergens in het werkgebied geklikt wordt. Tekst, zoals de labelling van knopen, wordt zichtbaar wanneer in het 'edit' menu via het commando 'window properties' 'text' aangevinkt wordt. Het netwerk kan voor veranderingen worden beschermd wanneer in dit scherm de optie 'edit' niet aangevinkt is. Met behulp van 'point size objects' kan de grootte van de netwerksymbolen bepaald worden. Op knoop 10 is een peilrand opgelegd met een constant peil van NAP - 1.00 m. Bodempeil van het deel van de sectie na de stuw (WEIR1) tot aan knoop 10 en peilrand zijn zo gekozen dat altijd een volkomen overlaat wordt gesimuleerd en de waterbeweging bovenstrooms niet wordt beïnvloed door het waterpeil benedenstrooms van de stuw. De layout van het netwerk wordt weergegeven in figuur 2.1.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor waterbeweging zijn bepaald met behulp van 'new initial conditions'. Hiertoe is een eerste simulatie uitgevoerd, waarbij tijdelijk het overstortdebiet gelijk aan nul is gesteld. Als waarden voor het initiële waterpeil en de initiële debieten zijn de waarden aan het einde van deze inleidende simulatie gebruikt.

De initiële concentraties aan bacteriën zijn eveneens met behulp van 'new initial conditions' vastgesteld. Hiertoe is weer een simulatie uitgevoerd zonder overstorting. De stationaire concentratieverdeling in het systeem aan het eind van deze simulatie is als initiële conditie voor de eigenlijke berekening gebruikt.

In dit geval mag geen initiële concentratie gelijk aan nul worden ingevoerd, omdat dit leidt tot een foutmelding. Immers de $^{10}\log(0)$ is niet gedefinieerd.

RANDVOORWAARDEN

Bovenstrooms op knoop 1 is om de verversing in het systeem te simuleren, een constant debiet van $0,1 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ als randvoorwaarde opgegeven. De overstorting is eveneens als een debietrand opgegeven. In dit voorbeeld is een niet equidistante tijdfunctie opgegeven. Dat wil zeggen dat de interval tussen de tijdstippen, waarop een waarde voor het debiet wordt opgegeven niet constant is. De ingevoerde waarden zijn afkomstig van een niet-stationaire rioleringsberekening en zijn met behulp van de optie 'import' in het 'Add scheme' scherm direct uit het uitvoerbestand van het rioleringsmodel ingelezen. Het 'Add scheme' scherm is beschikbaar via het 'Scenario' menu, commando 'scheme', optie 'Qadd', via 'add' in het 'select scheme' scherm.

Een andere mogelijkheid is het aanklikken van het commando 'object', optie 'properties' via het 'edit' menu. Onder de 'general' tab bevindt zich 'boundary conditions'. Na aanklikken verschijnt het 'boundary condition' veld. Door nu achter de parameter van de te importeren randvoorwaarde het grijze vlak met ... aan te klikken verschijnt de 'Select scheme' dialoog.

Door op de optie 'import' te klikken, verschijnt het 'import time series' schema, waarin het file geselecteerd kan worden dat ingelezen moet worden (zie figuur 2.2). De randvoorwaarde dient vervolgens aan knoop 1 toegekend te worden door via het 'edit' menu, commando 'object properties' bij knoop 1 als randvoorwaarde het betreffende schema te vermelden.

Voor alle knopen, waarvoor een peil- of debietrand is gebruikt is ook een randvoorwaarde voor de kwaliteit opgegeven. Aangenomen is dat het water voor de verversing geen bacteriën bevat. Op knoop 1 is dan ook een constante concentratie van 0 opgegeven. Voor de benedenstroomse rand (knoop 10) is dit ook het geval. De kwaliteit van het overstortende water (knoop 5) wordt constant verondersteld. Daar de concentratie in het model wordt uitgedrukt in $\text{mg} \cdot \text{l}^{-1}$ ($= \text{g} \cdot \text{m}^{-3}$), wordt het gehalte aan bacterien in de de nogal ongebruikelijke maat, aantal per m^3 uitgedrukt. Een bacterieconcentratie van $7,0 \cdot 10^6 \log(\text{N}/100 \text{ ml})$ is dan gelijk aan $1,0 \times 10^{11}$.

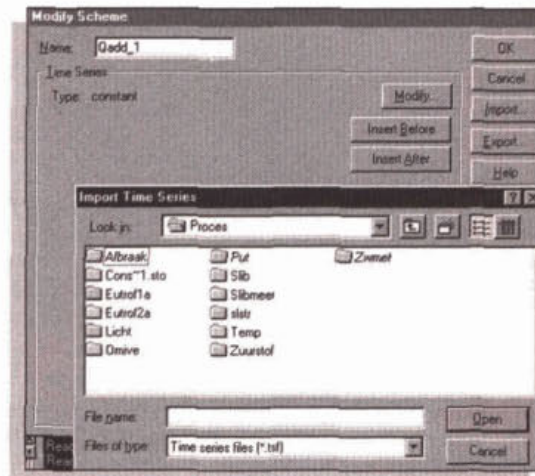
EXTERNE VARIABELEN

De waarde van externe variabelen kan als schema worden ingevoerd via het 'scenario' menu, commando 'external variables'. Vervolgens dient de externe variabele via het 'edit' menu, commando 'object properties' aan de knopen en kunstwerken te worden toegekend.

Behalve de dispersieconstante zijn er in dit model geen tijd- en plaatsafhankelijke invoervariabelen. Voor de dispersieconstante is in dit model een waarde van $5 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ gebruikt.

Figuur 2.2

De 'import time series' dialoog



PARAMETERS

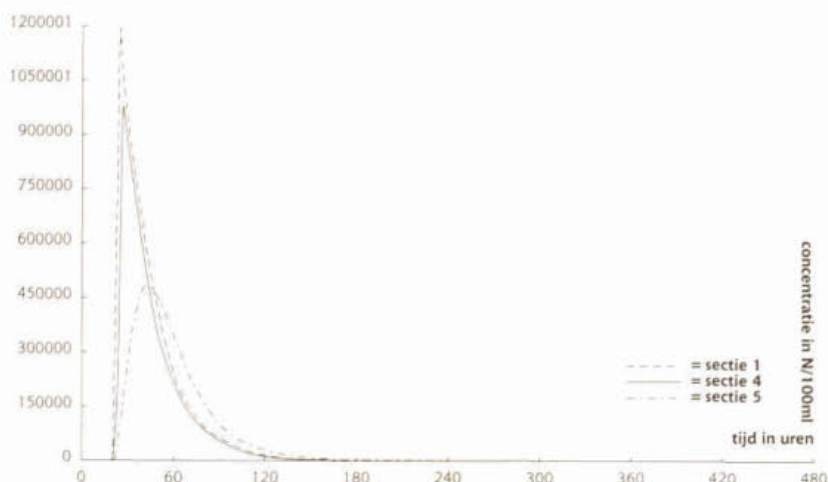
Aan de in het kwaliteitsmodel omschreven parameters kunnen via het 'scenario' menu of de Scenario manager, commando 'parameters', waarden toegekend worden.

De waarde voor k_d is ontleend aan tabel 2.2. De gebruikte waarde van $0,5 \text{ d}^{-1}$, is typisch voor E. Coli. De diffuse belasting is gelijk gesteld aan $1,10^6 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}$.

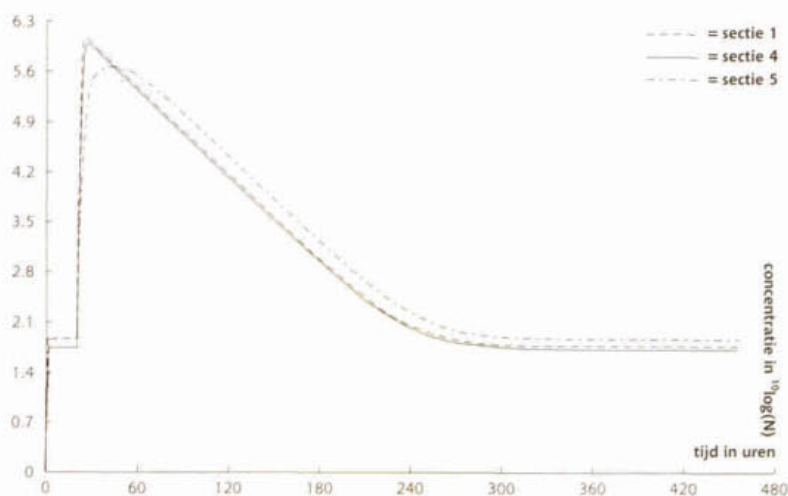
2.4.3 Resultaten

De figuren 2.3a en 2.3b tonen het gesimuleerde verloop van de concentratie aan bacteriën op een drietal locaties in het systeem. Uitgevoerd zijn de functies N en LogN. De gehalten in sectie 4, de doodlopende tak waarop de overstorting plaatsvindt, zijn als verwacht het hoogst. Ook in sectie 1, bovenstrooms in het systeem, zijn de concentraties hoog. Tijdens een overstorting vindt er een aanzienlijk transport van water in deze richting plaats. Benedenstrooms (sectie 5, tussen de stuw en knoop 10) is de maximale concentratie lager door dispersie en verwijdering. Figuur 2.3b laat zien dat na ca. 240 uur de achtergrondconcentraties weer worden bereikt.

Figuur 2.3a Aantal bacteriën N/100ml in sectie 1, 4 en 5



Figuur 2.2b $^{10}\log(N)$ in sectie 1, 4 en 5



Literatuur

Aalderink, R.H.,L.Lijklema. NWRW rapport 10.1.3, Loenen- bacteriologie en sediment. Staatsuitgeverij Den Haag. 1986.

Straaten , G van. Identification, uncertainty assesment and prediction in lake eutrophication. Dissertatie Universiteit Twente. Enschede 1986.

Thoman, R.V. and Mueller, J.A. 1987. Principles of Surface Water Quality Modelling and Control. Harper & Row, Publishers, New York.

■ Bijlage 1

Procesbeschrijvingen eerste orde afbraak (DECAY.MOD)

```
/* MODEL DECAY */
/* Eerste orde afbraak met diffuse bron */
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
/* Landbouwniversiteit Wageningen */
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
/* Postbus 8080 */
/* 6700 DD Wageningen */
```

Water	C	[0.000]	mg/l	:Concentratie verontreiniging
Parm	Kd	[0.100]	1/dag	:Snelheidsconstante verwijdering
Parm	Sd	[1.000]	g/m ² .dag	:Gedistribueerde bron
Flow	z	[2.000]	m	:waterdiepte

```
{
k1(C) = -Kd;
k0(C) = Sd/z;
}
```

Ten behoeve van deze specifieke toepassing is het model uitgebreid met een tweetal functies [$N = C/1000$ en $\log N = \log(N)$]. Deze maken het mogelijk de bacterie aantallen uit te voeren in $N/100\text{ml}$ en $^{10}\log(N/100\text{ml})$. Voor algemene toepassing kunnen deze functies weggelaten worden.

Deze aangepaste set procesbeschrijvingen is bijgeleverd onder de naam DECAY2.MOD.

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Zuurstofhuishouding

in stromende en stagnante watersystemen

hoofdstuk

3

juni 1996

L. Lijklema
R.H. Aalderink
H. de Ruiter

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Water Kwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

3

Inhoudsopgave

3.1 Zuurstofhuishouding 5

- 3.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5
- 3.1.2 Beperkingen 5

3.2 Procesbeschrijvingen 6

- 3.2.1 Reaëratie 6
- 3.2.2 BZV-afbraak 9
- 3.2.3 Nitrificatie 11
- 3.2.4 Primaire Productie 12
- 3.2.5 Sediment Zuurstof Verbruik (SZV) 14
- 3.2.6 Zuurstofinslag bij stuwen 14
- 3.2.7 Uitvoervariabelen 15

3.3 Benodigde invoer 16

- 3.3.1 Initiële condities 17
- 3.3.2 Randvoorwaarden 17
- 3.3.3 Parameters 18
- 3.3.4 Externe variabelen 19

3.4 Voorbeeld Oude Rijn 20

- 3.4.1 Situatieschets 21
- 3.4.2 DufLOW invoer 21
- 3.4.3 Resultaten 25

Literatuur 28

Bijlagen

Bijlage 1 Procesbeschrijvingen Zuurstof (ZUURSTOF.MOD) 29

3.1 Zuurstofhuishouding

Het model beschrijft de variatie in de zuurstofconcentratie ten gevolge van een aantal processen die op hun beurt weer afhankelijk zijn van omgevingscondities zoals temperatuur, lichtinstraling, stroomsnelheid etc.

De zuurstofconcentratie varieert in tijd en plaats door drie typen processen:

[1] Transportprocessen in (met) het water. Deze worden in DufLOW automatisch berekend in de transport modules. Het gaat om advectioneel transport (met de bulk stroom) en dispersief transport.

[2] Transportprocessen over grensvlakken. Dit betreft het grensvlak water-lucht: herbeluchting of reaëratie en het grensvlak bodem-water: sediment-zuurstofverbruik, SZV.

[3] Processen in het water zelf. Er zijn zuurstofproducerende processen, zoals primaire productie door waterplanten en/of algen en zuurstofverbruikende processen, waarbij stoffen worden geoxideerd, meestal door tussenkomst van micro-organismen. Het laatstgenoemde proces vat men daarom meestal samen onder de term: BZV (biologisch zuurstof verbruik).

Van de onder [2] en [3] genoemde processen wordt in paragraaf 3.2 een korte karakteristiek gegeven en een aantal mogelijke modelbeschrijvingen. Niet alle beschrijvingen zijn in het DUFLOW model opgenomen. In paragraaf 3.2 wordt aangegeven welke vergelijkingen in de set procesbeschrijvingen worden gebruikt. Welke processen men beschrijft en hoeveel detail men daarin wenst mee te nemen zal o.a. afhangen van de beschikbare invoergegevens, het belang van de berekeningen, de gewenste precisie en van de eigenschappen van het watersysteem.

3.1.1 Toepassingsmogelijkheden

Het model voor de zuurstofhuishouding kan in principe zowel voor stromende als semi stagnante wateren worden gebruikt. Toepassingsmogelijkheden kunnen worden gevonden in het simuleren van effecten van puntlozingen op het zuurstofgehalte van het ontvangende water. Met het model kan bijvoorbeeld het effect van een overstorting uit een gemengd rioolstelsel of van een effluentlozing worden voorspeld. Tevens kan het model worden gebruikt voor de analyse van maatregelen ter verbetering van de zuurstofhuishouding, zoals het doorspoelen van een systeem of het verwijderen van een zuurstof verbruikende sliblaag van de bodem. Dit laatste kan worden gesimuleerd door het sediment zuurstofverbruik te verlagen. Op een eenvoudige wijze wordt de productie van zuurstof door algen en waterplanten in het model beschreven, zodat eventueel ook het dag-/nachtritme in het zuurstofgehalte in rekening kan worden gebracht.

3.1.2 Beperkingen

Aangenomen wordt dat het water over de verticaal homogeen gemengd is. Voor stromende wateren is dit meestal het geval. In stagnante wateren kan echter stratificatie optreden. Condities waaronder dit met name gebeurt zijn windstilte en een hoge instraling (veel zon) en dan vooral in de wat diepere systemen. In zulke situaties kan dit model niet worden toegepast en is een twee-lagen model nodig.

Ook voor met kroos bedekte wateren is het model niet zonder meer toepasbaar.

Bedekking met kroos beïnvloedt de reaëratie en de instraling van zonlicht en daarmee de productie van zuurstof door de primaire producenten. In geheel bedekte systemen kan eventueel de zuurstofproductie worden uitgeschakeld en reaëratie gelijk aan nul worden gesteld. Voor systemen, die slechts gedeeltelijk bedekt zijn is niet direct een eenvoudige oplossing voorhanden en zal aanvullend onderzoek nodig zijn om de bijdrage van de beïnvloede processen vast te stellen.

Indien men met het model het dag-/nachtritme in de zuurstofconcentratie wil realiseren, moet men zich realiseren dat de parameters in deze beschrijvingen constant worden verondersteld. In werkelijkheid zijn deze dat niet. Zeker over langere periodes zullen deze variëren. Ondermeer door verschuivingen in de soortensamenstelling van de algenpopulatie en door aanpassing van de algen aan de omgevingscondities. Dit maakt het gebruik van deze optie van het model slechts over relatief korte tijdschalen mogelijk. Gedacht moet worden aan simulatieperioden van enkele dagen tot een week.

3.2 Procesbeschrijvingen

3.2.1 Reaëratie

Transport van zuurstof (en andere gassen) door het grensvlak water-lucht zal plaatsvinden wanneer het water met betrekking tot de lucht onder- of oververzadigd is, bijvoorbeeld door zuurstofverbruikende of -producerende processen. Bij evenwicht is het water verzadigd; de wet van Henry geldt, die zegt dat de concentratie C van een (slecht oplosbaar) gas in een vloeistof bij evenwicht evenredig is met de partiële druk P van dit gas:

$$[1] \quad C = H_e \cdot P$$

De evenredigheidsconstante H_e , de Henry constante is afhankelijk van de temperatuur en ook wel van het zoutgehalte van het water. De partiële druk van zuurstof is op zee-niveau vrijwel constant (0,2095 atm). Dat betekent dat de verzadigingsconcentratie van zuurstof in water vnl. een functie van de temperatuur is. Een relatie die dit beschrijft is:

$$[2] \quad O_s = 14,652 - 0,41022 T + 0,7991 \cdot 10^{-2} T^2 - 0,77774 \cdot 10^{-4} T^3$$

met O_s in mg/l (g/m^3) en T de temperatuur in $^{\circ}C$.

Een ingewikkelder, iets nauwkeuriger relatie die ook rekening houdt met het chloride-gehalte, is:

$$[3] \quad O_s = \exp \left[-139,34411 + \frac{1,575701 \cdot 10^5}{T} - \frac{6,642308 \cdot 10^7}{T^2} + \frac{1,243800 \cdot 10^{10}}{T^3} - \frac{8,621949 \cdot 10^{11}}{T^4} \right] - [Cl^-] \cdot \left[0,031929 - \frac{19,428}{T} + \frac{3867,3}{T^2} \right]$$

met Cl de chloriniteit in mg/l en T in °K. In het model wordt vergelijking 2 gebruikt om de afhankelijkheid van O_5 van de temperatuur te berekenen.

De zuurstofflux door het grensvlak lucht-water per eenheid van oppervlakte (m^2) is nu evenredig met de zgn. drijvende kracht: het verschil tussen de verzadigde en de actuele concentratie van zuurstof:

$$[4] \quad \Phi = K_l [O_s - O_2]$$

met F de flux in $g/m^2 \cdot d$ en K_l de stofoverdrachtscoëfficiënt in m/d .

Een positieve flux betekent dat zuurstof het water binnendringt. K_l is een maat voor de snelheid waarmee de zuurstof wordt overgedragen en heeft ook de dimensies daarvan. De waarde daarvan is vooral afhankelijk van de hydrodynamische condities nabij het grensvlak (de turbulentie) maar ligt meestal binnen de grenzen van 0,1 tot 5 m/d . Omdat het doel is de verandering in de zuurstofconcentratie uit te rekenen moet de per m^2 en dag toegevoerde hoeveelheid zuurstof nog worden gedeeld door de waterdiepte Z . De aldus verkregen constante K_l/Z wordt aangeduid als K_a , de reaëratie-constante (in dag^{-1}) en het effect van reaëratie op de zuurstofconcentratie wordt dus:

$$[5] \quad \frac{dC}{dt} = K_a [C_s - C] = \frac{K_l}{Z} [C_s - C]$$

Omdat door de hoge oppervlaktespanning van water nabij het grensvlak aan de waterzijde als het ware een dun, star filmpje ontstaat, waarin de turbulentie 'uitsterft' (de schaal en intensiteit van de eddies neemt sterk af), wordt de waarde van K_l vooral bepaald door de dikte van dit laagje waardoor de zuurstof moet diffunderen. Die dikte wordt minder naarmate er meer turbulentie heerst. In stromend water ontstaat die vooral door wrijving langs de bodem: de meeste relaties voor K_l zijn dan ook functies van de stroomsnelheid u , eventueel de schuifspanningssnelheid of een grootte die verband houdt met het energieverlies, bijvoorbeeld het verhang. Ook is K_l omgekeerd evenredig met de waterdiepte tot een macht die, evenals bij u verschilt voor de diverse onderzoekers. De meeste relaties zijn empirisch: gebaseerd op experimentele waarnemingen. Een relatie die een theoretische achtergrond heeft en vrij veel wordt gebruikt, is die van O'Connor en Dobbins (1958):

$$[6] \quad K_l = 3,67 u^{0,5} Z^{-0,5}$$

met u in m/s , de diepte Z in m en K_l in m/d .

De hiermee gesimuleerde waarden zijn in het algemeen hoog vergeleken met de empirisch gevonden waarden, bijvoorbeeld volgens Churchill et. al (1962), gemeten in het gebied $0,56 < u < 1,52 \text{ m/s}$ en $0,65 < Z < 3,48 \text{ m}$:

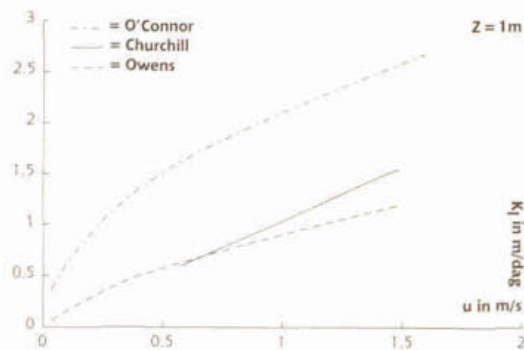
$$[7] \quad K_l = 2,18 u^{0,969} Z^{-0,673}$$

Bij de resultaten van Owens et. al (1964) zijn ook gegevens gebruikt waarbij lage stroomsnelheden voorkomen: $0,03 < u < 1,5$ en $0,12 < Z < 3,36$ leidend tot:

$$[8] \quad K_t = 2.33 u^{0.67} Z^{-0.85}$$

Dat de verschillen tussen de diverse uitkomsten vrij aanzienlijk kunnen zijn blijkt uit figuur 3.1, waarin de 3 relaties zijn geplott als functie van de stroomsnelheid voor een waterdiepte van 1 m.

Figuur 3.1 Stofoverdrachtscoëfficiënten in stromend water als functie van de stroomsnelheid bij $Z = 1$ m



De relatie volgens Owens (vergelijking 8) is in het model opgenomen. Bij extreem lage stroomsnelheden, zoals die vaak voorkomen in semi stagnant water leveren de empirische relaties een stofoverdrachtsconstante gelijk aan nul, hetgeen niet realistisch is. Daarom kan in het model een minimale waarde voor K_t worden ingevoerd (zie 3.3.3)

In stagnante wateren is wind, soms ook regen, de belangrijkste factor die de turbulentie nabij het oppervlak en dus de stofoverdrachtscoëfficiënt regelt.

Een door Banks (1975) afgeleide relatie is:

$$[9] \quad K_t = 0.0864[8.43W^{0.5} - 3.67W + 0.43W^2]$$

met W de windsnelheid op 10 m hoogte en K_t wederom in m/d. Bij $W=0$ zou K_t ook 0 worden, hetgeen niet juist is. De tangens aan de curve van vergelijking 9 voor $W=1.82$ m/s wordt wel gebruikt voor windsnelheden < 1.82 m/s, dit levert:

$$[10] \quad K_t = 0.37 + 0.09W$$

Stefan en Fang (1994) leidden af:

$$[11] \quad K_t = 0.02256[0.10656 \exp(-0.0627T) + 0.00495]^{-0.5} W^{1.64}$$

met K_t weer in m/d, W in m/s op 10 m hoogte en T in $^{\circ}\text{C}$. De relatie volgens Banks, weergegeven in vergelijking 9 en 10, is in deze set procesbeschrijvingen opgenomen.

TEMPERATUURINVLOED

Alleen vergelijking 11 bevat een factor voor de temperatuur. De overige relaties gelden voor een standaard temperatuur van 20°C . Meestal wordt een temperatuurcoëfficiënt van 2,4% per graad Celsius aangehouden, zodat:

$$[12] \quad K_t(T) = K_t(20) \cdot (1.024)^{(T-20)}$$

3.2.2 BZV-afbraak

BZV₅ EN BZV_∞

Afbraak van organische stof door micro-organismen gaat gepaard met zuurstofgebruik. Deze stoffen kunnen afkomstig zijn van lozingen, met name effluenten van rioolwaterzuiveringen en incidenteel overstortingen. Daarnaast wordt zuurstof verbruikt om ingevallen blad, afgestorven algen en waterplanten etc. te oxyderen; meestal aangeduid als 'detritus'. De respiratie door algen wordt in modellen meestal niet meegenomen onder de afbraak van BZV, maar apart beschreven als een verliesterm bij de primaire productie. Het is echter zo dat in metingen van het zuurstofverbruik het onderscheid tussen algen-respiratie en BZV niet goed te maken is. Vandaar dat in dit model de respiratie door algen eveneens als BZV wordt beschouwd.

Wat betreft de externe lozing van effluenten zijn vaak gegevens beschikbaar (of te schatten) van de concentratie of vracht in termen van BZV₅, o.a. omdat heffingen in die termen worden vastgesteld. Echter, de organische stof heeft in het ontvangende water in principe de mogelijkheid langer dan 5 dagen te oxyderen en de omstandigheden waaronder de oxydatie plaats vindt zijn ook geheel anders dan in de flesjes waarin BZV wordt bepaald. In modellen wordt daarom gerekend met de uiteindelijk door biologische processen afbreekbare hoeveelheid stof (in termen van zuurstofequivalenten): de BZV_∞. Men moet de BZV₅ dus omrekenen naar deze grootte en bij aanneme van eerste orde afbraak geldt :

$$[13] \quad BZV_{\infty} = \frac{BZV_5}{(1 - e^{-K_d})}$$

zodat voor externe lozingen de omrekening naar BZV_∞ kan plaatsvinden indien de afbraaksnelheid K_d bekend is. In het model wordt dit automatisch gedaan (zie ook 3.3.2). Indien BZV₅ betrekking heeft op het effluent van een normale RWZI en de meting in het laboratorium heeft plaats gevonden zal de waarde van K_d ongeveer 0,2 zijn, zodat BZV_∞ ongeveer 60% hoger is dan BZV₅. Dit geldt ook voor monsters oppervlaktewater waarvan in het laboratorium de BZV₅ is gemeten, bijvoorbeeld om de bovenstroomse concentratie te meten. Het is belangrijk te bedenken dat de K_d -waarde die hier is besproken laboratoriumwaarden bij 20 °C betreft; in het veld zijn de waarden meestal anders (afhankelijk van de temperatuur meestal hoger). In het model kan BZV₅ worden ingevoerd als kwaliteit van de lozing en ook wordt BZV₅ uitgevoerd. In de zuurstofbalans wordt echter gerekend met de BZV_∞. Voor de omrekening wordt gebruik gemaakt van vergelijking 13, waarbij voor K_d de opgegeven waarde bij 20 °C wordt gebruikt.

BZV AFBRAAK EN ZUURSTOFVERBRUIK IN OPPERVLAKTEWATER

De verwijderingssnelheid van BZV in het oppervlaktewater zelf wordt nu op verschillende manieren beschreven. Indien geen of nauwelijks bezinkende deeltjes aanwezig zijn en vanuit het sediment geen noemenswaardige afgifte van oxydeerbare organische stoffen geacht wordt plaats te vinden, is de verwijdering te beschrijven met:

$$[14] \quad \frac{dBZV}{dt} = -K_d \theta^{(T-20)} BZV$$

waarbij de term θ de temperatuurcoëfficiënt is, waarvan de grootte meestal in de range 1,03 tot 1,05 wordt genomen. De K_d -waarde (in dag⁻¹) is dus de waarde bij de

standaard temperatuur van 20 °C. Deze term hangt niet alleen af van de afbreekbaarheid van de organische stof, maar ook van de aantallen en activiteit van de aanwezige micro-organismen en zelfs van de stromingscondities (turbulentie). Het is dan ook niet verwonderlijk dat literatuurwaarden nogal verschillen. Indien sediment-zuurstofverbruik (SZV) niet apart wordt gemodelleerd, is dit proces impliciet besloten in de beschrijving van vergelijking 14 en zal in ondiepe wateren k_d hoger zijn. Dit omdat veel micro-organismen zich aan de bodem hechten en daar organische stof verwijderen en oxyderen. Voor de relatief ondiepe nederlandse oppervlaktewateren zijn waarden van omstreeks 0,2 tot 0,3 per dag gebruikelijk. Voor vers overstortend rioolwater dat vele goed afbreekbare componenten bevat, moet met een verdubbeling worden gerekend. Vergelijking 14 beschrijft zowel de verwijderingssnelheid van BZV als het daarmee gepaard gaande zuurstofverbruik.

Een iets meer gedetailleerde beschrijving van het lot van BZV is:

$$[15] \quad \frac{dBZV}{dt} = -\frac{V_s}{Z} (1-f_d)BZV - K_d \theta^{(T-20)} BZV \frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} + \frac{S_{BZV}}{Z}$$

Hierbij wordt rekening gehouden met de verminderde oxydatiesnelheid indien de zuurstofconcentratie laag wordt. De Monod constante K_{O_2} is hiervoor de maatgevende factor; de waarde is in de orde van grootte van 1 mg/l.

De eerste term in het rechterlid beschrijft de bezinking van de niet opgeloste (dissolved) fractie $(1-f_d)$. V_s is de sedimentatiesnelheid in $m \cdot dag^{-1}$. Indien een belangrijk aandeel van de BZV in gesuspendeerde vorm aanwezig is (bijvoorbeeld na een overstorting) kan dit belangrijk zijn. De BZV komt in het sediment terecht en kan na hydrolyse etc. leiden tot een nalevering van BZV. Deze nalevering van BZV kan worden gerepresenteerd door de laatste term in vergelijking 15. De in deze term gedefinieerde S_{BZV} heeft de dimensie van een flux ($g \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$) en kan ook worden gebruikt om een diffuse belasting met BZV te simuleren. Balansvergelijking 15 is in het model opgenomen voor de beschrijving van de verwijdering van BZV.

AFBREEKBAARHEID

Een beperking van vergelijking 14 en 15 is dat de afbraaksnelheid K_d constant wordt verondersteld terwijl in feite de makkelijk afbreekbare stoffen het eerst, en relatief snel, worden verwijderd, terwijl het achterblijvende materiaal steeds langzamer afbreekt. Vooral indien men systemen modelleert met lange verblijftijden kan dit een probleem zijn. Een mogelijk alternatief is dan om een beschrijving te kiezen met 2 klassen BZV, BZV_1 en BZV_2 met verschillende K_d waarden en eventueel ook voor f_d en S_{BZV} . Er moeten wel de nodige (veld)gegevens beschikbaar zijn wil dit werkelijk tot betere resultaten leiden!

Een andere modelbenadering is de aanname dat de slecht afbreekbare fractie kan worden gevormd door een gedeeltelijke oxydatie van de goed afbreekbare. In feite is dit het geval bij de humusvorming, die bijvoorbeeld als volgt kan worden weergegeven:

$$[16] \quad \frac{dBZV_2}{dt} = \alpha \frac{dBZV_1}{dt} - K_d BZV_2$$

waarbij α de fractie slecht afbreekbaar materiaal is die wordt gevormd en $(1-\alpha)$ de fractie die wordt geoxideerd; α zal ongeveer 0,1 zijn. De afbreesnelheid K_{d2} zal zeer laag zijn.

Een andere reden om twee klassen BZV te onderscheiden is dat de afbreekbaarheid van geloosd materiaal sterk kan verschillen van de reeds in de achtergrondsituatie aanwezige organische stof. Met name bij overstortingen uit gemengde rioolstelsels is dit van belang. De geloosde BZV afkomstig van de lozing uit het rioolstelsel heeft in de regel een veel hogere K_d waarde dan de achtergrond BZV. Daarom wordt in het model onderscheid gemaakt tussen twee soorten BZV (BZV_1 en BZV_2). Door de keuze van de waarde van K_d kunnen verschillen in afbreekbaarheid in rekening worden gebracht. Voor beide klassen BZV wordt de balansvergelijking weergegeven door vergelijking 15.

3.2.3 Nitrificatie

Effluenten van niet nitrificerende RWZI's bevatten vaak relatief veel ammonium of Kjeldahl-stikstof. Ook voor overstortingen geldt dit. In het model wordt alleen ammonium beschreven. Dat betekent dat wordt aangenomen dat het organische gebonden N snel wordt gehydrolyseerd tot ammonium, dat kan worden genitrificeerd in het ontvangende oppervlaktewater. Afhankelijk van de beschikbare gegevens kan totaal gereduceerd stikstof (Kjeldahl-N) worden ingevoerd. De ammoniumbalans wordt dan:

$$[17] \quad \frac{d(NH_4)}{dt} = \alpha \frac{dBZV_1}{dt} - K_{nit} \theta_{nit}^{(T-20)} \frac{O_2}{K_{NO_2} + O_2} NH_4 + \frac{S_{NH_4}}{Z}$$

Deze vergelijking lijkt sterk op die voor de BZV balans (vergelijking 15), afgezien van de bezinkterm. De nitrificerende bacteriën zijn echter gevoeliger voor temperatuur, waardoor θ hoger is. Waarden tussen 1,05 en 1,10 worden in de literatuur gegeven. Bij (ongebruikbaar) hoge temperaturen ($> 30^\circ C$) treedt remming op. Het aantal nitrificerende bacteriën dat aanwezig is, is bepalend voor de grootte van K_{nit} . Hoge waarden zijn te verwachten in ondiepe wateren met bovenstreams goed nitrificerende RWZI's en een gunstige pH (7,5-9,5). Waarden van (veel) meer dan 1 per dag zijn te vinden in de literatuur. Ook zijn waarden te vinden van 0,1 per dag en minder. Kalibratie zal vaak nodig zijn. Evenals in vergelijking 15 de oxydatiesnelheid van BZV evenredig wordt verondersteld met de concentratie daarvan - een eerste orde proces dus - wordt de oxydatiesnelheid van ammonium in vergelijking 17 ook evenredig met de concentratie daarvan beschreven. Dit is een goede benadering voor oppervlakte-wateren, waarin de BZV concentratie en de ammonium concentratie meestal vrij laag zijn. De iets meer gedetailleerde beschrijving met een Monod afhankelijkheid van de ammoniumconcentratie voor de oxydatieterm uit vergelijking 17 die in actief slib modellen wel wordt gebruikt:

$$[18] \quad \frac{d(NH_4)}{dt} = -K_{nit} \frac{NH_4}{K_N + NH_4} \theta_{nit}^{(T-20)} \frac{O_2}{K_{NO_2} + O_2}$$

is dan niet nodig omdat de ammoniumconcentratie laag is ten opzichte van de Monod constante K_N en dus een lineaire relatie met de ammoniumconcentratie resulteert.

De gevoeligheid van nitrificatie voor lage zuurstofconcentraties is groter dan voor de 'gewone' BZV, tot uitdrukking komend in een wat hogere waarde voor K_N-O_2 (1 à 2 mg/l) dan voor de overeenkomstige term KO_2 in vergelijking 15 (ca 1 mg/l). In feite wordt hiermee bereikt dat indien de zuurstofconcentraties laag zijn, de competi-

tie voor zuurstof tussen nitrificerende en heterotrofe bacteriën in het voordeel van de laatste wordt beslecht.

De tweede term in het rechterlid van vergelijking 17 beschrijft de afgifte van ammonium door sediment ($\text{g N}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{dag}^{-1}$). Tenzij het sediment sterk vervuild is en (vrijwel) volledig anaëroob is, is deze term laag en te verwaarlozen voor zover het om de zuurstofhuishouding gaat.

De eerste term in het rechterlid, vermenigvuldigd met 4,57, beschrijft de snelheid waarmee zuurstof wordt onttrokken aan het water door de nitrificatie. Deze volgt uit de stoichiometrie van de oxydatie-reactie: bij volledige oxydatie tot nitraat is per g gereduceerd N 4,57 g O_2 nodig. Hoewel het mogelijk is met de tussenstap via nitriet te rekenen, is dit niet gebruikelijk omdat dit tussenproduct meestal snel wordt doorgeoxydeerd. Ook de opname van ammonium in de bacteriemassa en eventueel aanwezige algen (waterplanten) wordt als regel niet gemodelleerd omdat de relatieve betekenis t.o.v. de nitrificatie beperkt is.

3.2.4 Primaire productie

Vaak wordt de zuurstofhuishouding sterk beïnvloed door de zuurstofproductie door algen en/of (ondergedoken) waterplanten, die bij groei zuurstof produceren en afgeven aan het water. Dit kan leiden tot (sterke) oververzadiging bij hoge concentraties (dichtheden) van deze producenten en goede lichtcondities. Fytoplankton, vrij zwevende algen, bewegen met het water mee. In stromende wateren kan het nodig zijn om rekening te houden met concentratiegradiënten van algen (en dus in het zuurstofproductie-vermogen) als gevolg van het transport door stroming. Ondiepe stromende wateren (beken bijvoorbeeld) kunnen gedomineerd worden door waterplanten en/of sessiele (vastzittende) algen, waardoor de zuurstofproductie op korte termijn niet van het transport door stroming afhankelijk is, maar wel in de ruimte kan variëren als gevolg van dichtheidsverschillen in de vegetatie. In stilstaande wateren (meren, plas-sen) zal de zuurstofproductiesnelheid in principe ook ruimtelijk kunnen variëren, maar menging door wind leidt er vaak toe dat geen sterke (horizontale of verticale) gradiënten in de zuurstofconcentratie ontstaan, zodat met een gemiddelde productiesnelheid kan worden gewerkt.

Afhankelijk van de beschikbare gegevens en de doelstellingen kan de primaire productie in verschillende mate van detail worden gemodelleerd. Hier worden alleen beschrijvingen gepresenteerd waarbij de plantengroei (algengroei) zelf niet wordt gesimuleerd; zie hiervoor de eutrofiëringsmodellen.

Een zeer eenvoudige benadering voor de zuurstofproductie P (in $\text{gO}_2\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{dag}^{-1}$) wordt gegeven door:

$$[19] \quad P = \alpha I$$

waarin I de lichtintensiteit in $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$ is en meestal als PAR (Photosynthethic Available Radiation) wordt opgegeven. Meestal is circa 50% van de ingestraalde kortgolvlige lichtenergie bruikbaar voor fotosynthese. I kan worden gemeten in de tijd of, indien alleen dagsommen van de instraling (I_d) van bijvoorbeeld het KNMI beschikbaar zijn kan hieruit de ideale (sinusvormige) verdeling van de instraling aan het oppervlak $I(0,t)$ over de dag worden afgeleid volgens:

$$[20] \quad I(0,t) = \frac{I(0,\max)}{2} \left(1 + \cos \frac{2\pi(t-12)}{L}\right)$$

voor $12 - 0.5L < t < 12 + 0.5L$

waarbij $I(0,\max)$ de maximale instraling midden op de dag aan het wateroppervlak is, die bij benadering uit de dagsom volgt volgens:

$$[21] \quad I(0,\max) = 2 \frac{I_d}{L}$$

L is de daglengte in uren.

In de term α , die de dimensie $\text{gO}_2 \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{dag}^{-1}$ per $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$ heeft zitten de effecten van de concentratie (dichtheid) van de biomassa, de groeisnelheid daarvan als functie van de lichtintensiteit en de heersende temperatuur, de lichtuitdoving in de waterkolom en omrekeningsfactoren voor de tijd-dimensie verdisconteerd. Omdat de meeste van deze factoren in de tijd kunnen variëren zal α geen constante zijn. Men kan een gemeten of gekalibreerde waarde dus niet zonder meer voor langere perioden gebruiken.

Iets meer detail wordt verkregen indien het effect van de algenbiomassa (of dichtheid van waterplanten) apart wordt meeberekend, bijvoorbeeld omdat gegevens over de algenconcentratie -meestal als chlorophyl- zijn gemeten, berekend of als te onderzoeken grenswaarde worden ingevoerd. De term α wordt dan geschreven als $\alpha = \beta \cdot [A]$ met $[A]$ de chlorophylconcentratie in $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$. De relatie wordt:

$$[22] \quad P = \beta \cdot I \cdot [A]$$

met β in $\text{g O}_2 \text{ dag}^{-1} \cdot \text{mg Chl}^{-1} \cdot (\text{W} \cdot \text{m}^{-2})^{-1}$.

In vergelijking 19 en 22 kan in plaats van de lichtintensiteit aan het oppervlak (instraling) ook gewerkt worden met de over de waterkolom gemiddelde lichtintensiteit:

$$[23] \quad \bar{I} = \frac{1}{Z} \int_0^Z I(0) e^{-\epsilon z} dz$$

hetgeen gelijk is aan:

$$[24] \quad \bar{I} = \frac{I_0}{\epsilon Z} [1 - \exp(-\epsilon Z)]$$

met z de diepteoordinaat en Z de (gemiddelde) waterdiepte. Deze relatie is goed bruikbaar zolang de groeisnelheid van de algen, en daarmee de zuurstofproductiesnelheid, lineair evenredig zijn met de lichtintensiteit. Voor niet te hoge lichtintensiteiten is dat een goede aanname. Vergelijking 24 biedt daarmee de gelegenheid eventuele gegevens over de lichtuitdoving (de extinctie-coëfficiënt ϵ) te gebruiken.

Een verdergaande detaillering rekent met de algengroeisnelheid als functie van de lichtintensiteit en de bijdrage van de algen aan de lichtuitdoving in de waterkolom. Hiervoor wordt verwezen naar de eutrofiëringsmodellen EUTROF1 en EUTROF2. In deze modellen wordt de biomassa als functie van de tijd uitgerekend en de zuurstofproductie gerelateerd aan de toename van de biomassa. In dit model voor de zuurstofhuishouding wordt gebruik gemaakt van een eenvoudiger benadering volgens vergelijking 22. Dit betekent dat de gebruiker zelf de biomassa moet opgeven.

3.2.5 Sediment Zuurstof Verbruik (SZV)

Verbruik van zuurstof door het sediment is het gevolg van de microbiologische afbraak van organische stoffen waarmee het sediment wordt belast: bezinkende afgestorven algen en waterplanten, detritus, faeces van zoöplankton of vis, invallend blad, van elders aangevoerde organische stof etc. De afbraak vindt in stappen plaats, waarbij hydrolyse-achtige omzettingen de grotere moleculen ontleden en o.a. laagmoleculaire vetzuren ontstaan die door bacteriën kunnen worden gemetaboliseerd indien er zuurstof beschikbaar is. Bij afwezigheid daarvan kan ook nitraat worden gebruikt als oxydatiemiddel (waterbodems kunnen flink bijdragen aan stikstofverliezen van water systemen) of sulfaat, ferri-ionen of ook CO_2 . Dit laatste, anaërobe proces leidt tot vorming van methaan, CH_4 , dat als gas kan ontwijken (moerasgas), maar ook in opgeloste vorm naar de zuurstofrijke grenslaag met het water kan diffunderen en daar worden geoxideerd door micro-organismen. Dit laatste is het belangrijkste, uiteindelijk zuurstof-verbruikende, proces.

Het SZV ligt in grootte meestal tussen de $0,5$ en $2 \text{ g O}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$. In zeer sterk vervuilde bodems kan het oplopen tot $10 \text{ g O}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$. Indien men over meetgegevens of schattingen beschikt, kan men de waarde als een constante invoeren. Het effect op de zuurstofconcentratie wordt verkregen door te delen door de waterdiepte Z :

$$[25] \quad \frac{d\text{O}_2}{dt} = - \frac{\text{SZV}}{Z}$$

Het SZV is afhankelijk van de stroomsnelheid (turbulentie) nabij het grensvlak: de diffusie van zuurstof en reducerende stoffen worden beiden versneld, waardoor de oxydatiesnelheid toeneemt. Ook het zuurstofgehalte van het bovenstaande water is van invloed, zowel eenvoudige theoretische modellen als veldwaarnemingen tonen dat het SZV toeneemt met ongeveer de wortel uit de zuurstofconcentratie:

$$[25] \quad \text{SZV}(\text{O}_2) = \text{SZV}(\text{O}_{2,\text{ref}}) \sqrt{\frac{\text{O}_2}{\text{O}_{2,\text{ref}}}}$$

Waarin $\text{SZV}(\text{O}_{2,\text{ref}})$ het sedimentzuurstofverbruik bij een referentie zuurstofgehalte ($\text{O}_{2,\text{ref}}$) is.

In het model wordt de zuurstofafhankelijkheid van het SZV niet beschreven. Het SZV moet door de gebruiker als externe variabele worden opgegeven, waarbij deze eventueel als functie van tijd en plaats kan variëren. De afhankelijkheid van de temperatuur wordt evenals voor andere processen beschreven middels een temperatuurcoëfficiënt. Een typische waarde voor $\theta_{\text{SZV}} = 1,060$.

3.2.6 Zuurstofinslag bij stuwen

Bij stuwen wordt sprongsgewijs zuurstof ingebracht: het deficit daalt met een percentage dat o.a. afhankelijk is van de vorm van de stuw, de valhoogte en de waterdiepte beneden de stuw en de watertemperatuur.

Door het sprongsgewijze karakter en omdat de verandering in het deficit ook afhangt van het (in principe nog te berekenen) benedenstroomse deficit, is het niet mogelijk deze herbeluchting als een proces te formuleren analoog aan de voorgaande. Een oplossing zal moeten worden gezocht in bijvoorbeeld een input van zuurstof op de rand van een sectie, hetgeen alleen voor niet te sterk variërende debieten redelijk

eenvoudig lijkt. Een empirische relatie die de verandering in deficiet beschrijft is:

$$[27] \quad l(0,t) = \frac{D_a - D_b}{D_a} = [1 + 0.36 \cdot a \cdot b \cdot H \cdot (1 - 0.112 \cdot H) \cdot (1 + 0.046 \cdot T)]^{-1}$$

waarin D_a en D_b de deficieten bovenstrooms resp. benedenstrooms in mg.l^{-1} zijn, H de valhoogte (afstand van de waterspiegels) in m en T de temperatuur in $^{\circ}\text{C}$.

De empirische constanten a en b verdisconteren kenmerken van het water en van de overlaat:

$a = 1,80$	– schoon water
$a = 1,60$	– licht verontreinigd water
$a = 1,00$	– gemiddeld verontreinigd water
$a = 0,65$	– sterk verontreinigd water
$b = 1,05$	– scherpe overlaat met horizontale kruin
$b = 0,80$	– scherpe overlaat; V-vormig
$b = 0,70$	– brede overlaat
$b = 0,05$	– verdronken onderleider

In de praktijk is gebleken dat deze relatie in het algemeen redelijke schattingen geeft mits de valhoogten en/of het bovenstroomse deficiet niet te klein zijn. In die gevallen is de zuurstofinbreng echter toch gering. Het zal duidelijk zijn dat niet alle bepalende factoren verdisconteerd zijn in vergelijking 27, bijvoorbeeld de stroomsnelheid en de waterdiepte achter de stuw. De inbreng van zuurstof door stuwen is niet in deze set procesbeschrijvingen opgenomen.

3.2.7 Uitvoervariabelen

Als uitvoer van het model kunnen naast de gedefinieerde toestandsvariabelen een aantal andere grootheden worden opgevraagd. Deze zijn gedefinieerd in het bestand, waarin de procesbeschrijvingen zijn weergegeven (ZUURSTOF.MOD) en zijn als FUNCTION uit te voeren. In principe kunnen op deze wijze alle variabelen in het bestand (ZUURSTOF.MOD) links van een =-teken worden uitgevoerd. Zie hiervoor ook de DUFLOW handleiding. Interessante variabelen in dit model, die kunnen worden uitgevoerd zijn onder meer het verzadigingsgehalte (OS) en de totaal BZV concentratie (BZV5). Tevens worden in het model de verschillende termen in de zuurstofbalans apart uitgerekend. Door deze uit te voeren kan vaak op eenvoudige wijze inzicht in het belang van de bijdrage van de verschillende processen worden verkregen. De termen in de balansvergelijking zijn onder de volgende namen op te vragen:

REAR	reaëratie
BZVOX	de som van de oxydatie van BZV ₁ en BZV ₂
SEDO2	het sedimentzuurstofverbruik
NITRIF	zuurstofverbruik t.g.v. nitrificatie
PO2	zuurstofproductie

Alle termen hebben als dimensie $\text{g O}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$.

3.3 Benodigde invoer

In deze paragraaf wordt slechts de invoer, die specifiek is voor het zuurstofmodel beschreven. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging wordt verwezen naar de DUFLOW-handleiding. Verder wordt voor specifiek aan het transport gerelateerde invoer verwezen naar hoofdstuk 1 over het transport van conservatieve stoffen. Tabel 3.1 geeft een overzicht van de benodigde invoer voor het zuurstofmodel.

Tabel 3.1 Benodigd invoermodel voor de zuurstofhuishouding

Type	Naam	Bron	Typische waarde
Initiële condities	O ₂ Waterkolom	Meting	
	BZV ₁		
	BZV ₂		
	NH ₄		
Rand-voorwaarden	O ₂ Systeemgrens	Meting	
	BZV ₁		
	BZV ₂		
	NH ₄		
	O ₂ Puntlozingen	Meting	
	BZV ₁ BZV ₂ NH ₄		
Parameters	K _{l,min} Minimale stofoverdrachtsconstante voor stromende systemen	Literatuur	0,1 m.dag ⁻¹
	θ _{Kl} Temperatuurcoëfficiënt stofoverdracht	Literatuur	1,024
	K _{d1} Snelheidsconstante BZV ₁ -afbraak	Literatuur Kalibratie (experimenteel)	0,4-0,8 dag ⁻¹
	K _{d2} Snelheidsconstante BZV ₂ -afbraak	Literatuur Kalibratie (exper.)	0,1-0,3 dag ⁻¹
	V _{s1} Sedimentatiesnelheid BZV ₁	Literatuur (exper.)	1-5 m.dag ⁻¹
	V _{s2} Sedimentatiesnelheid BZV ₂	Literatuur (exper.)	< 1 m.dag ⁻¹
	f _{d1} Fractie opgelost BZV ₁	Literatuur(exper.)	0,3-0,4 (overstort)
	f _{d2} Fractie opgelost BZV ₂	Literatuur (exper.)	0,8-1,0
	K _{O₂} Monodconstante O ₂ remming BZV afbraak	Literatuur	1 mg O ₂ .l ⁻¹
	θ _{Kd} Temperatuurcoëfficiënt BZV-afbraak	Literatuur	1,03-1,05
	K _{nit} Snelheidsconstante nitrificatie	Literatuur Kalibratie	0,1-1,0 dag ⁻¹
	θ _{Knit} Temperatuurcoëfficiënt nitrificatie	Literatuur	1,05-1,10
	K _{NO₂} Monodconstante O ₂ remming nitrificatie	Literatuur	1,0-2,0 mg O ₂ .l ⁻¹

Type	Naam	Bron	Typische waarde
Parameters	β Zuurstofproductie constante	Literatuur Kalibratie	10^{-4} - 10^{-3} g O ₂ dag ⁻¹ .mg Chl ⁻¹ .(W.m ⁻²) ⁻¹ .
	θ_{SZV} Temperatuurcoëfficiënt SZV	Literatuur	1,060
	OPT _{KI} Optie stofoverdracht (0 = stagnant; 1 = stromend)		
Externe variabelen	D Dispersieconstante	Literatuur/exper.	Zie hoofdstuk 1 paragraaf 1.3.4
	T Watertemperatuur	Meting/Schatting	
	S _{BZV1} Diffuse belasting BZV ₁	Schatting	Systeemspecifiek
	S _{BZV2} Diffuse belasting BZV ₁	Schatting	Systeemspecifiek
	S _{NH4} Diffuse belasting NH ₄	Schatting/meting	Systeemspecifiek
	I ₀ Instraling [PAR] wateroppervlak	KNMI	
	A Algenbiomassa	Meting	10-200 µg .l ⁻¹
	SZV Sedimentzuurstofverbruik	Literatuur (exper.)	0,5-2,0 g.m ⁻² .dag ⁻¹
	W Windsnelheid	KNMI	

3.3.1 Initiële condities

In het model zijn vier toestandsvariabelen gedefinieerd. Voor elk van deze variabelen moet de toestand op tijdstip nul worden opgegeven. Veelal wordt op basis van metingen een schatting gemaakt van de initiële toestand. Voor complexe netwerken is dit echter vaak niet eenvoudig. In dergelijke gevallen kan door het uitvoeren van een inleidende simulatie een schatting van de initiële condities worden gemaakt. Hierbij kan gebruik worden gemaakt van de optie 'new initial conditions' in de 'scenario manager' (zie Hoofdstuk 1, paragraaf 1.3.1)

Indien primaire productie van belang is, dient men er rekening mee te houden, dat de zuurstofconcentratie over de dag grote variaties kan vertonen. Dat betekent, dat het niet eenvoudig is op basis van metingen een schatting van de initiële toestand te verkrijgen. Ook het inrekenen van het model leidt in dat geval meestal niet tot een goede schatting van het gehalte aan zuurstof op tijdstip $t=0$. Gevolg is dat de resultaten van de simulatie voor de eerste dag tot 2 dagen minder betrouwbaar zijn. Dit hangt uiteraard ook samen met de verblijftijd in het systeem (zie hoofdstuk 1, paragraaf 1.3.1).

3.3.2 Randvoorwaarden

Zowel op de randen van het te simuleren systeem, als voor alle lozingen op het systeem dient voor de vier onderscheiden toestandsvariabelen een randvoorwaarde op te worden gegeven. Op de systeemgrens wordt vaak een schatting gemaakt op basis van metingen. Indien niet voldoende metingen voorhanden zijn, dient de systeemgrens zo gekozen te worden, dat de randvoorwaarden de resultaten van de berekeningen op het punt waar men geïnteresseerd niet meer beïnvloeden. Dit speelt vooral in systemen waarin zuurstof productie een belangrijke rol speelt en men geen gedetailleerde metingen van de variaties binnen de dag van het zuurstofgehalte heeft op de systeemranden. Vaak wordt dan een constant gehalte op de rand aangenomen en wordt door

simulatie proefondervindelijk vastgesteld of de keuze van de randvoorwaarden niet de resultaten op het punt van interesse beïnvloeden.

Puntlozingen worden in DUFLOW ook beschouwd als randvoorwaarden. Voor alle toestandsvariabelen moet de kwaliteit van de lozing worden opgegeven. Dit betekent dat aan al het water dat het systeem inkomt een kwaliteit moet worden toegekend. In principe komt het er op neer dat voor alle randvoorwaarden gedefinieerd ten behoeve van het waterbewegingsmodel ook een kwaliteitsrandvoorwaarde moet worden toegekend. Doet men dit niet dan resulteert dit in een waarschuwing tijdens de berekening (zie ook paragraaf 1.3.2).

3.3.3 Parameters

Het zuurstof model bevat een groot aantal parameters, waarvan er een aantal goed gedefinieerd zijn en waarvoor literatuurwaarden kunnen worden gebruikt. Voor andere parameters geldt dat ze sterk systeemafhankelijk zijn en eigenlijk alleen door procesonderzoek in het te bestuderen systeem kunnen worden vastgesteld of door kalibratie kunnen worden bepaald. Tabel 3.1 geeft voor alle parameters typische waarden of ranges.

Parameters waarvoor zonder problemen een literatuurwaarde kan worden gebruikt zijn bijvoorbeeld de coëfficiënten, die de afhankelijkheid van de diverse processen van de temperatuur beschrijven. Dit geldt ook voor de Monod constanten voor de remming van BZV afbraak en nitrificatie bij lage zuurstofgehalten.

De snelheidsconstante voor de afbraak en oxydatie van BZV hangen sterk af van de aard van de organische stof. De afbreekbaarheid van het materiaal is hiervoor van belang (zie paragraaf 3.2.2). Vers organisch materiaal heeft een hoge K_d waarde, terwijl voor minder goed afbreekbaar materiaal de waarde veel lager is. Een schatting van de orde van grootte kan dus worden verkregen op basis van de karakteristieken van het materiaal. Wil men echter een nauwkeuriger schatting, dan zal men aanvullend onderzoek moeten verrichten of de waarde van K_d door kalibratie van het model moeten vaststellen.

Dit geldt ook voor de sedimentatiesnelheid van de onderscheiden types BZV en de opgeloste fracties hiervan. Meestal representeert één type BZV de organische stof, die wordt geloosd en wordt de andere gebruikt om de achtergrond BZV te simuleren. Voor de achtergrond BZV kan meestal worden aangenomen dat dit nauwelijks sedimenteert en dat de opgeloste fractie gelijk aan 1 is. Voor BZV dat tijdens een overstorting wordt geloosd daarentegen geldt dat wel tot 50% van de organische stof in particuliere vorm aanwezig is en een dusdanig hoge sedimentatiesnelheid heeft dat het zeer snel uit de waterkolom wordt verwijderd en niet leidt tot directe zuurstofvraag.

Ook voor de snelheidsconstante voor nitrificatie geldt, dat deze van systeem tot systeem nogal kan verschillen. De aanwezigheid van voldoende nitrificerende bacteriën is vaak bepalen voor de orde van grootte van deze snelheidsconstante. Kalibratie is vaak de enige manier om een goede schatting voor deze parameter te verkrijgen.

De zuurstofproductie-constante β kan eventueel worden geschat uit het dag/nachtritme in het verloop van de zuurstofconcentratie. Ook kan deze waarde experimenteel worden bepaald met behulp van lichte en donkere flessen experimenten. Deze parameter kan overigens sterk variëren en hangt af van de soortensamenstelling en de conditie, waarin de algen of waterplanten zich bevinden. De in tabel 3.1 gegeven waarden moeten dan ook slechts gezien worden als richtwaarden, die enigszins een indruk

geven van de orde van grootte.

De stuurvariabele OPT_{K_I} is gedefinieerd als parameter en geeft aan welke empirische relatie voor de berekening van de stofoverdrachtsconstante wordt gebruikt. Indien $OPT_{K_I} = 0$ dan wordt K_I bepaald door de wind. Deze relatie is bedoeld voor semi-stagnante systemen. K_I wordt in dat geval berekend met behulp van vergelijking 9 en 10. Indien $OPT_{K_I} = 1$ dan wordt de empirische relatie volgens Owens gebruikt (vergelijking 8). Daar deze relatie bij lage stroomsnelheden leidt tot extreem lage waarden voor K_I , wordt in dat geval de stofoverdrachtsconstante gelijk gesteld aan een door de gebruiker op te geven minimale waarde voor K_I ($K_{I,min}$). Een typische waarde voor deze parameter is ca. $0,1 \text{ dag}^{-1}$.

3.3.4 Externe variabelen

De dispersieconstante dient als externe variabelen ingevoerd te worden. Voor een overzicht van typische waarden hiervoor zie hoofdstuk 1.3.4.

Instralingsgegevens kunnen, zoals is aangegeven in paragraaf 3.2.4 worden verkregen uit de dagsommen globale straling, zoals die door het KNMI worden gemeten. Uiteraard kunnen deze ook direct worden gemeten, met een registrerende lichtmeter, die meet in het PAR gebied. Het detail van de meting hangt af van het systeem en van het doel van de simulatie. Is men geïnteresseerd in de variaties in het zuurstofgehalte binnen een dag, dan moet men uiteraard het verloop van de instraling over de dag ook als invoer gebruiken. In dat geval worden typische kwartier- tot uurwaarden voor de instraling gebruikt. Deze kunnen eventueel worden berekend uit de dagsommen met behulp van vergelijking 20 en 21.

De algenbiomassa wordt in het model niet berekend. Om de productie van zuurstof door algen of waterplanten in rekening te brengen, dient de gebruiker deze zelf in te voeren. Een schatting kan worden verkregen hetzij uit metingen, hetzij met behulp van simulaties met een ander model (bijv. EUTROF1) waarin de algenbiomassa wel wordt berekend.

Het sedimentzuurstofverbruik (SZV) wordt in het model constant verondersteld. Typische waarden liggen in de orde van $0,5$ tot $2,0 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{dag}^{-1}$. Zoals in paragraaf 3.2.5 is aangegeven hangt het SZV af van de zuurstofconcentratie in de waterkolom. Met name bij lage concentratie zuurstof leidt het rekenen met een constante SZV tot een overschatting van de bijdrage hiervan in de zuurstofbalans. Indien de zuurstof gehalten erg laag kunnen worden in het te bestuderen systeem, dan verdient het aanbeveling vergelijking 26 in het model te implementeren. Het SZV kan experimenteel zowel in het veld als in het laboratorium worden vastgesteld. Een schatting kan ook worden verkregen uit het gemeten deficit tijdens een periode met een redelijk constante zuurstofconcentratie, bijvoorbeeld gedurende een periode waarin er nauwelijks primaire productie is. In dat geval geldt dat de reaëratie in evenwicht is met de zuurstof verbruikende processen, waarvan het SZV meestal het belangrijkste is. In dat geval geldt voor het stationaire deficit D_{stat} :

$$[28] \quad D_{stat} = \frac{SZV}{Z \cdot K_I}$$

Bij het gebruik van vergelijking 28 wordt aangenomen, dat de afbraak van BZV en de nitrificatie kan worden verwaarloosd. Vaak is dat wel het geval. Indien dit niet zo is kan hier eventueel voor worden gecorrigeerd.

De diffuse belastingen voor BZV_1 , BZV_2 en NH_4 zijn eveneens sterk systeem specifiek. Een schatting kan worden verkregen uit een stofbalans over het systeem. Echter in de praktijk zijn veelal onvoldoende (nauwkeurige) gegevens voorhanden om een balans sluitend te krijgen. Vaak worden de diffuse belastingen gebruikt om een achtergrondconcentratie te simuleren. Zo zal na een puntlozing de concentratie ammonium of BZV nooit geheel naar 0 dalen. Er wordt een stationaire concentratie bereikt. Er ontstaat een evenwicht tussen productie (+ aanvoer) en afbraak. De diffuse belasting kan gebruikt worden om dit achtergrondnivo te simuleren. Een schatting, kan dan ook worden verkregen uit:

$$[29] \quad S_x = K_x C_{stat} Z$$

waarin S_x de diffuse belasting is van de stof, K_x de afbraaksnelheid en C_{stat} de stationaire achtergrondconcentratie.

3.4 Voorbeeld Oude Rijn

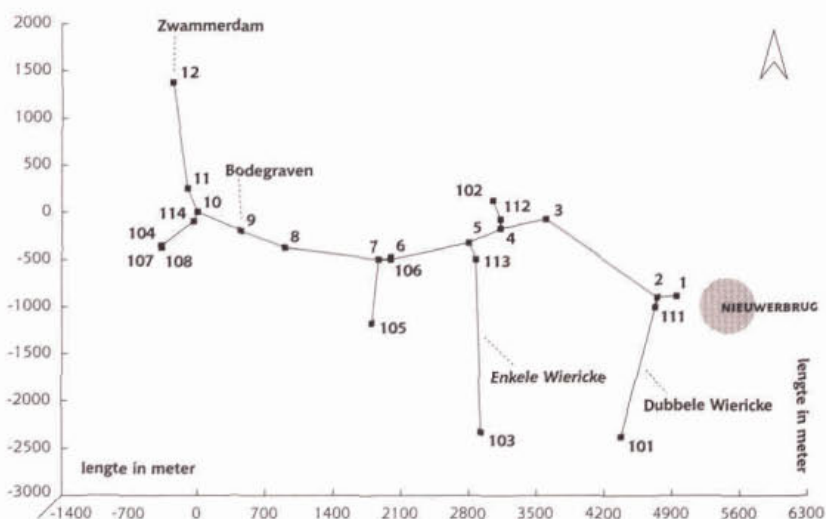
Het uitgewerkte voorbeeld bij dit model is ontleend aan een probleem met de zuurstofhuishouding in de Oude Rijn, aangedragen door het Hoogheemraadschap van Rijnland. Het betreft het stuk tussen Nieuwerbrug en Zwammerdam. De Oude Rijn stroomt hier door de kern van Bodegraven en aldaar is gedurende een aantal jaren de zuurstofconcentratie wekelijks gemeten. Met name gedurende de zomer worden hier lage zuurstofgehaltenes (2 tot 3 $mg \cdot l^{-1}$) gevonden. Doel van deze toepassing is de problematiek nader te analyseren en de oorzaak van de lage zuurstofgehaltenes te achterhalen. Nadrukkelijk wordt vermeld dat het gaat om een illustratief voorbeeld en dat aan de uitkomsten geen ver strekkende conclusies over het systeem mogen worden verbonden. Daar er in het kader van het ontwikkelen van deze toepassing onvoldoende tijd was om voldoende invoergegevens te verzamelen zijn er nogal wat aannames gemaakt, die de resultaten kunnen hebben beïnvloed.

Dit is typisch een voorbeeld waarbij het model over een langere periode wordt toegepast. Totaal wordt een periode van 1 jaar doorgerekend, waarbij vooral de het verloop van het zuurstofgehalte in de zomermaanden van belang is. Kort termijn variaties in de concentratie aan zuurstof worden niet beschreven, daar deze gezien de aard van de problematiek en de doelstelling van de berekeningen niet van belang zijn. Vandaar dat het dag nacht ritme in de zuurstof ten gevolge van productie niet is meegenomen. Bovendien blijkt uit metingen dat het chlorofylgehalte in de Oude Rijn behalve een korte periode in het voorjaar lager is dan 40 $mg \cdot l^{-1}$, zodat primaire productie een ondergeschikte rol speelt. Ook het effect van overstortingen uit het gemengde rioolstelsel van Bodegraven is in de simulaties niet meegenomen. Deze leiden tot korte termijn effecten, die gezien de tijdschaal waarover wordt gekeken niet interessant zijn. Overigens kunnen de effecten van een overstorting met name tijdens de zomermaanden, wanneer het zuurstofgehalte toch al laag is, uiteraard dramatisch zijn en leiden tot volledige zuurstofloosheid.

3.4.1 Situatieschets

Figuur 3.2 toont het deel van de Oude Rijn dat wordt gesimuleerd. Bovenstrooms wordt het gebied begrensd door Nieuwerbrug. Op deze locatie ligt een monsterpunt van het routine meetnet voor de waterkwaliteit. De benedenstroomse randvoorwaarde wordt gevormd door een lozingspunt even bovenstrooms Zwammerdam. Op het traject slaan een vijftal polders water uit. Daarnaast vindt er zijdelings toevoer plaats vanuit de Enkele en Dubbele Wiericke. Tevens wordt benedenstrooms Bodegraven het effluent van de RWZI geloosd op een relatief smalle zijtak. Figuur 3.2 geeft een overzicht van de lozingen, zijtakken en poldergemalen. Wanneer het netwerk opgeroepen wordt in DUFLOW wordt een onoverzichtelijk beeld gekregen door de vele dwarsdoorsnedes. Door in het editor scherm te gaan staan en rechts te klikken met de muis verschijnt de optie 'show objects'. Weer klikken levert een scherm op, waarin door middel van aan- en uitvinken van objecttypen gekozen kan worden welke objecten worden getoond.

Figuur 3.2 Schematisering van de Oude Rijn



3.4.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

De schematisering is gemaakt met behulp van een topografische kaart (schaal 1:25.000). Gedetailleerde legger informatie was niet voorhanden. Daar het gaat om een simulatie over lange tijdschalen is gedetailleerde invoer van alle geometrische data ook niet echt noodzakelijk. Wel is van belang dat dimensies van het systeem zo goed mogelijk de werkelijkheid benaderen. Dit om de stroomsnelheden en vooral de verblijftijden in de diverse secties zo goed mogelijk te simuleren. De belangrijkste overwegingen bij het maken van de schematisering waren dan ook de ligging van de puntlozingen, zijtakken en gemalen. Op deze locaties zijn knopen gedefinieerd. Verder is bij de indeling in secties rekening gehouden met dimensies van de secties. Deze zijn zo gekozen, dat de dwarsdoorsnede voor een sectie zo veel mogelijk uniform is.

De x- en y-coördinaten van de knooppunten zijn afgelezen van de kaart, waarbij zelf een oorsprong is gedefinieerd. Als een digitale kaart in het shapefile formaat beschikbaar is, kunnen de knooppunten hierop rechtstreeks worden aangegeven. Voor de lengte van de secties zijn de door DUFLOW uit de x- en y-coördinaten

berekende waarden gebruikt. De niveaus van de bodem aan het begin en eind van elke sectie zijn berekend op basis van de geschatte waterdiepten en een waterpeil van NAP -0,45 m.

Gegevens over de dwarsdoorsneden waren niet voorhanden. De breedtes zijn geschat tijdens een bezoek in het veld. Bodembreedtes zijn aangenomen evenals de vorm van het dwarsprofiel.

Er zijn geen kunstwerken gedefinieerd. De schutsluis in het centrum van Bodegraven is in één van de secties opgenomen en niet apart als kunstwerk gemodelleerd. Eventueel zou deze als underflow kunnen worden opgenomen.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor de waterbeweging zijn bepaald met behulp van de optie 'new initial conditions' (zie hiervoor Hoofdstuk 1 paragraaf 1.3.1).

De keuze van de initiële condities is voor de simulatie van de kwaliteit in dit geval niet zo belangrijk. Het model rekt snel in. Na enkele dagen is het effect van de keuze van de initiële condities reeds verdwenen.

RANDVOORWAARDEN

Tabel 3.2 geeft een overzicht van de gebruikte randvoorwaarden. Voor knoop 9 zijn debietgegevens beschikbaar. Nabij de sluis in het centrum in Bodegraven is gedurende enkele jaren continue met behulp van een akoestische debietmeter de afvoer van de Oude Rijn gemeten. Deze gegevens zijn gebruikt om de bovenstroomse randvoorwaarde te construeren. Op basis van een waterbalans per maand over het traject tussen knoop 1 en 9 is een schatting gemaakt van het debiet op knoop 1. Bij het opstellen van de waterbalans over het traject is gebruik gemaakt van informatie afkomstig uit een globale waterbalans over het totale gebied opgesteld door het Hoogheemraadschap de Stichtse Rijnlanden.

Tabel 3.2 Randvoorwaarden voor kwaliteit en kwantiteit

Knoop	Omschrijving	Kwantiteit		Kwaliteit	
		Type	Bron	Type	Bron
1	Bovenstroomse randvoorwaarde	Qadd weekgemiddeld	Waterbalans debietmeting	Constance concentratie jaargemiddelde	Routine meetnet
12	Benedenstroomse randvoorwaarde	Peil constant	Streefpeil	-	-
101	Dubbele Wiericke	Qadd maandgemiddeld	Waterbalans Stichtse Rijnlanden	Constance concentratie jaargemiddelde	Schatting
102	Gemaal Weijland en de Bree	Qadd maandgemiddeld	Waterbalans Stichtse Rijnlanden	Constance concentratie jaargemiddelde	Schatting
103	Enkele Wiericke	Qadd maandgemiddeld	Waterbalans Stichtse Rijnlanden	Zomer- en wintergemiddelde concentratie	Routine meetnet
104	Gemaal Buleaus Brack	Qadd tijdfunctie	Draaiuren en capaciteit Waterschap Gouwlanden	Constance concentratie jaargemiddelde O ₂ maandelijks	Routine meetnet
105	Gemaal Zuidzijder polder	Qadd maandgemiddeld	Waterbalans Stichtse Rijnlanden	Constance concentratie jaargemiddelde	Schatting
106	Gemaal Noordzijder polder	Qadd maandgemiddeld	Waterbalans Stichtse Rijnlanden	Constance concentratie jaargemiddelde	Schatting
107	Gemaal Binnen polder	Qadd constant	Draaiuren en capaciteit Waterschap Gouwlanden	Constance concentratie jaargemiddelde	Schatting
114	RWZI Bodegraven	Qadd constant	Schatting	Constance concentratie	Monstername RWZI

De afvoer van de twee zijtakken en het debiet van een andere gemalen is eveneens ontleend aan deze studie. Maandgemiddelde gegevens waren beschikbaar. Het debiet van de RWZI is geschat op basis van het aantal inwoner equivalenten (i.e.'s). Benedenstrooms is een constant peil opgelegd als randvoorwaarde. Het opgelegde waterpeil op knoop 12 is gebaseerd op het streefpeil voor de boezem.

Voor het gemaal Buleaus Brack is op basis van draaiuren en de capaciteit, beschikbaar gesteld door het Waterschap de Gouwlonden, een tijdfunctie van het debiet gemaakt. Ook voor het gemaal van de Binnen polder waren eveneens draaiuren beschikbaar. Daar de hoeveelheid water die door dit gemaal wordt uitgeslagen gering is en het gemaal vrijwel continu draait is deze lozing als een constante Qadd ingevoerd.

Aan elke lozing of andere toevoer moet een kwaliteit moet worden toegekend. Voor de vier toestandvariabelen (O_2 , BZV_1 , BZV_2 en NH_4) is dan ook voor alle knopen, waarop een randvoorwaarde voor de kwantiteit is opgegeven een kwaliteitsrandvoorwaarde gedefinieerd.

Tabel 3.2 geeft een overzicht van de randvoorwaarden in het kwaliteitsmodel. Daar waar mogelijk is gebruik gemaakt van gegevens afkomstig uit het routine meetnet waterkwaliteit. Op de meeste locaties wordt hier maandelijks gemonsterd. Op enkele locaties is de bemonsteringsfrequentie slechts eens per twee maanden. De data zijn onderzocht op periodiciteit en daar waar duidelijk een seizoensinvloed waarneembaar was is hier rekening mee gehouden. Dit geldt onder meer voor het zuurstofgehalte in het water uitgeslagen door het gemaal Buleaus Brack en de waterkwaliteit in het toevoerwater in de Enkele Wiericke. Indien de data geen duidelijke periodiciteit vertoonden is een jaargemiddelde concentratie gebruikt. Voor een aantal polders waren geen kwaliteitsgegevens beschikbaar. Aan de kwaliteit van het uitgeslagen water is in dit geval een constante jaargemiddelde kwaliteit toegekend, gebaseerd op de karakteristieke gehalten voorkomend in de polders waarvoor wel gegevens voor handen waren. Uit het bovenstaande blijkt dat er eigenlijk onvoldoende gegevens waren om verantwoorde schattingen van de waarde voor de randvoorwaarden te maken.

Voor knoop 12 de benedenstroomse peilrand zijn ook kwaliteitsrandvoorwaarden opgegeven. Eigenlijk is dit niet nodig omdat het water op dit punt altijd uitstroomt. Geeft men echter geen randvoorwaarde voor de kwaliteit op, dan resulteert dit in een waarschuwing tijdens de berekeningen. Voor alle stoffen is op deze rand een concentraties gelijk aan 0 opgegeven.

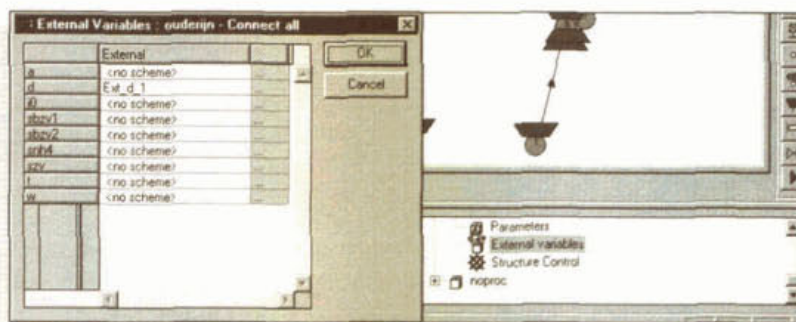
In het zuurstofmodel worden twee typen BZV onderscheiden. Voor deze toepassing wordt echter slechts een soort BZV gebruikt. Er wordt alleen gerekend met BZV_2 , representatief voor het minder goed afbreekbare materiaal. Voor deze toepassing is geen aanleiding onderscheid te maken tussen goed en slecht afbreekbare organische stof. Zowel het BZV geloosd door de RWZI als het BZV afkomstig van andere lozingen en detritus heeft ongeveer de zelfde snelheidsconstante voor de afbraak. Voor BZV_1 is op elke rand een waarde van 0 opgegeven.

Voor NH_4 is gebruik gemaakt van Kjeldahl stikstof gegevens, zoals wordt aangegeven in paragraaf 3.2.3.

EXTERNE VARIABELEN

Voor de dispersie is een waarde van $50 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ gebruikt. Deze waarde is geschat op basis van de empirische relatie gegeven in hoofdstuk 1 (zie paragraaf 1.3.4). De waarde voor de dispersie is toegekend aan alle relevante objecten in het netwerk. Wanneer één schema voor een variabele van toepassing is voor het gehele netwerk kan de waarde aan alle relevante objecten worden toegekend door in de scenario manager met de rechtermuisknop te klikken op 'external variables' en te kiezen voor de optie 'connect to all objects'. In het scherm 'Connect all' kan nu voor dispersie voor een schema gekozen worden, dat voor alle relevante objecten in het netwerk geldt. Het scherm is weergegeven in figuur 3.3.

Figuur 3.3 'Connect all' dialoog



Daar de zuurstofproductie door algen niet in het model wordt meegenomen zijn geen instalingsgegevens nodig. Voor IO is een waarde gelijk aan nul opgegeven. Ook windgegevens zijn niet nodig voor deze simulatie, daar voor reaëratie die optie voor stromende systemen wordt gebruikt. Voor de watertemperatuur is gebruik gemaakt van maandelijkse meetwaarden, waarmee een tijdfunctie is gedefinieerd.

Er is geen gebruik gemaakt van de mogelijkheid diffuse belastingen op te geven voor BZV en NH_4 . Enerzijds omdat hier geen gegevens voor waren en anderzijds ook omdat voor dit boezemsysteem de belasting vooral wordt bepaald door puntlozingen als uitslag van gemalen, toevoer van water van elders en de belasting vanuit de RWZI.

Voor het SZV is een literatuurwaarde gebruikt van $1 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$, een waarde karakteristiek voor niet zwaar belaste waterbodems.

PARAMETERS

Daar primaire productie niet in het model wordt meegenomen is aan β de waarde nul toegekend. Ook voor de sedimentatiesnelheid van BZV is een waarde van nul gebruikt. Aangenomen wordt dat BZV in dit geval niet onderhevig is aan sedimentatie. Voor beide typen BZV is de opgeloste fractie gelijk aan 1 gesteld. Overigens wordt in deze toepassing slechts één type BZV onderscheiden. Aangenomen wordt dat alle BZV van het type slecht afbreekbaar is. Als snelheidsconstante wordt een waarde van 0.1 dag^{-1} gebruikt. Alhoewel BZV₁ niet wordt gesimuleerd, moet aan de snelheidsconstante voor de afbraak van deze fractie K_{d2} toch een waarde ongelijk aan nul worden toegekend. Doet men dit niet dan resulteert dit in een foutmelding tijdens de berekeningen, omdat dan door nul wordt gedeeld bij de berekeningen van de BZV_w (zie vergelijking 13).

Voor de snelheidsconstante voor nitrificatie K_{nit} is een waarde van 0.1 dag^{-1} aangenomen. Voor de temperatuurcoëfficiënten is de default waarde gebruikt. Dit geldt ook voor de beide monodconstanten, die de remming van de BZV oxydatie en de nitrificatie bij lage zuurstofgehalten bepalen.

Voor de reaëratie is gebruikt gemaakt van optie 1. Dat wil zeggen dat de stof-overdrachtsconstante voor zuurstof wordt bepaald door stroming. Als minimale waarde voor K_1 bij $20 \text{ }^\circ\text{C}$ is de default waarde van $0.1 \text{ m} \cdot \text{dag}^{-1}$ gebruikt.

Algemeen geldt dat gebruikt is gemaakt van waarden uit de literatuur. Er is geen poging ondernomen het model te kalibreren. Hiervoor waren niet voldoende gegevens voor handen. Met name over de belasting van het systeem is onvoldoende informatie beschikbaar.

CALCULATION SETTINGS

De duur van de simulatieperiode is 1 jaar. Er wordt een tijdstap gebruikt van 12 uur, zowel voor de kwantiteit en de kwaliteit. De uitvoer wordt eveneens om de 12 uur bewaard. De keuze van de tijdstap is proefondervindelijk vastgesteld. Het rekenen met een te grote tijdstap leidt tot instabiliteit, vaak te herkennen aan het optreden van negatieve en sterk oscillerende uitkomsten. De maximaal te gebruiken tijdstap hangt zowel af van het transport als ook van de processen. Indien er in het model snelle processen worden gedefinieerd, dan bepalen deze de maximaal toegestane tijdstap. Sedimentatie is een zo'n snel proces dat hiervoor vaak bepalend is. Wanneer bijvoorbeeld met het model het effect van overstortingen wordt gesimuleerd dan zal een grote sedimentatiesnelheid van het geloosde organische materiaal worden gebruikt. In dat geval dient men met een veel kleinere tijdstap te rekenen. In dit voorbeeld wordt echter niet gewerkt met sedimentatie. Indien men het dag-/nachtritme in de zuurstofconcentratie wil simuleren, dan dient uiteraard de tijdstap zo te worden gekozen dat de resultaten met voldoende resolutie kunnen worden uitgevoerd.

3.4.3 Resultaten

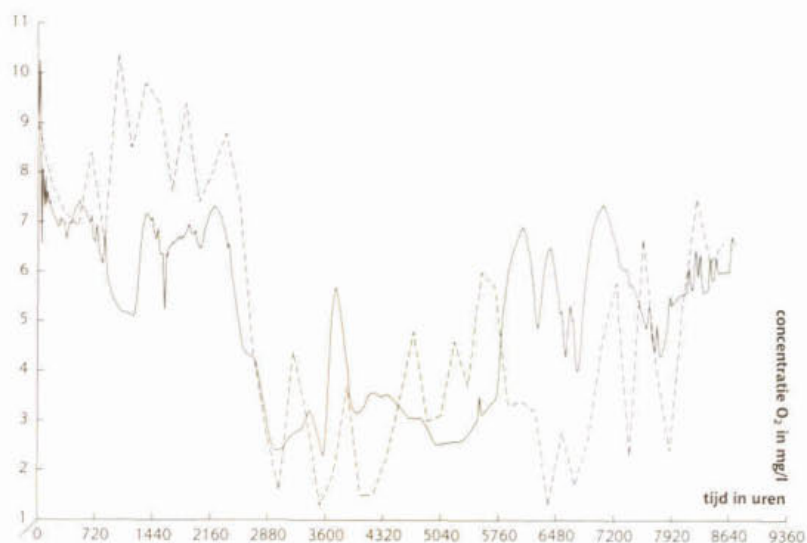
Figuur 3.4.a toont de resultaten van de simulatie over het jaar 1994 op knoop 9. Deze knoop komt overeen met de locatie waar met een wekelijkse frequentie het zuurstofgehalte is gemeten. Uit de resultaten blijkt dat het model het globale verloop van het zuurstofgehalte redelijk voorspelt. Zowel de metingen als de uitkomsten vertonen in de zomermaanden extreem lage zuurstofconcentraties. In het voorjaar wordt de zuurstofconcentratie onderschat. De metingen vertonen daar een hogere concentraties. Dit wordt mogelijk veroorzaakt door het optreden van een bloei van diatomeen. Het chlo-rofylgehalte is vrijwel altijd lager dan 40 mg.l^{-1} behalve in het voorjaar, waar waarden tot 100 mg.l^{-1} worden gevonden. Daar de zuurstofproductie in dit voorbeeld niet is meegenomen, kan het model de hogere concentraties in het voorjaar niet beschrijven. Ook in het najaar lopen de modeluitkomsten en de metingen uiteen. Tijdens deze periode worden te hoge zuurstofconcentraties voorspeld. Hiervoor is niet direct een oorzaak te geven. Mogelijk wordt de belasting tijdens deze periode onderschat.

Nogmaals dient benadrukt te worden dat het model niet is gekalibreerd en de simulaties met literatuurwaarden voor de parameters zijn uitgevoerd. Kalibratie werd niet opportuun geacht, gezien de grote onzekerheid in de belasting van het systeem. Niet alleen de belasting met BZV en gereduceerd stikstof is bepalend voor het zuurstofgehalte. De concentratie wordt eveneens beïnvloed door de aanvoer van zuurstof-arm water van elders. In een aantal toevoerstromen komen lage O_2 -gehaltes voor. Het is dan ook de vraag of de lage gehalten aan O_2 in de zomermaanden worden veroorzaakt door de zuurstofverbruikende processen of door de aanvoer van zuurstofarm water. In dat verband is het interessant een simulatie uit te voeren, waarbij de processen worden uitgeschakeld. Dan wordt het gehalte aan zuurstof alleen bepaald door menging en transport. In figuur 3.4.b worden de resultaten van deze berekening vergeleken met die van de simulatie met processen. De simulatie waarbij de processen zijn uitgeschakeld, levert wel wat lagere O_2 -gehaltes in de zomermaanden. Er wordt een minimaal gehalte berekend van ca. 6 mg.l^{-1} . Figuur 3.4.b toont ook aan dat de aanvoer van zuurstofarm water in de zomer wel een rol speelt, maar dat de lage zuurstofconcentraties in deze periode vooral worden veroorzaakt door de zuurstofverbruikende processen.

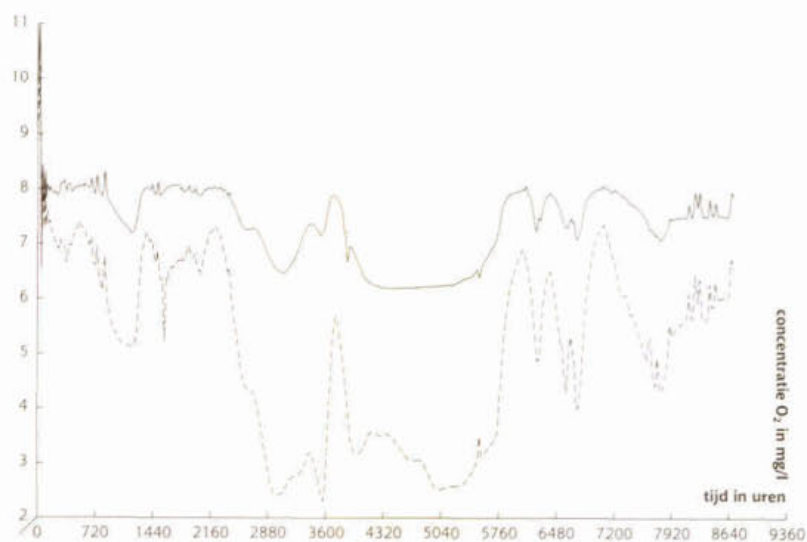
Het model biedt de mogelijkheid om de verschillende termen in de zuurstofbalans apart uit te voeren. Deze zijn weergegeven in figuur 3.4.c. Het blijkt dat in de zomer

nitrificatie het belangrijkste proces is in de zuurstofhuishouding. Echter ook de oxydatie van BZV en het zuurstofverbruik door het sediment leveren een belangrijke bijdrage aan de totale zuurstofvraag. Met name in de zomermaanden leidt dit door de geringe verversing tot de extreem lage zuurstofgehalten. Gedurende de zomer is er nauwelijks stroming in de Oude Rijn en kan de verblijftijd oplopen tot enkele weken.

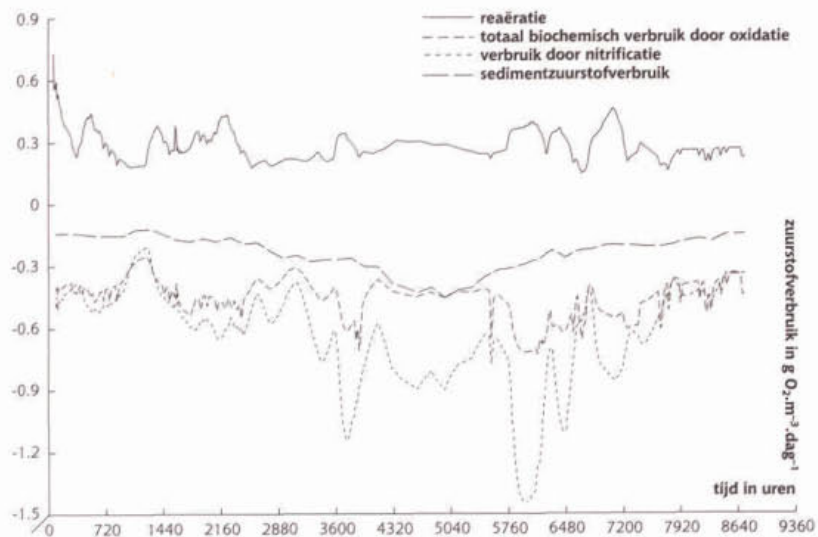
Figuur 3.4.a Gemeten en gesimuleerd zuurstofgehalte over 1994 op knoop 9



Figuur 3.4.b Vergelijking van gesimuleerde zuurstofgehalten met en zonder zuurstofverbruikende processen



Figuur 3.4.c Bijdrage van de processen in de zuurstofbalans voor de periode 1994 op knoop 9



Literatuur

Banks, R.B., 1975. Some features of wind action on shallow lakes. Am. Soc. Civ. Eng., J. Environ. Eng. Div. 101 (EE5):813-827.

Churchill, M.A., H.K. Elmore, and R.A. Buckingham, 1962. Prediction of stream reaeration rates, J. Sanit. Eng. Div., Proc. Am. Soc. Civ. Eng., SA4:1, Proc. Paper 3199.

O'Connor, D.J., and W.E. Dobbins, 1958. Mechanism of reaeration in natural streams, Trans. Am. Soc. Civil Eng. 123:655.

Owens, M., R. Edwards, and J. Gibbs, 1964. Some reaeration studies in streams, Int. J. Air Water Poll. 8:469-486.

Stefan, H.G., and Xing Fang, 1994. Dissolved oxygen model for regional lake analysis. Ecol. Modelling 71:37-68.

■ Bijlage 1

**Procesbeschrijvingen zuurstofmodel
(ZUURSTOF.MOD)**

```

/* MODEL VOOR DE ZUURSTOFHUISSHODING IN STROMENDE */
/* EN STAGNANTE WATERSYSTEMEN */
/* */
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
/* */
/* Landbouwniversiteit Wageningen */
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
/* Postbus 8080 */
/* 6700 DD Wageningen */

```

WATER O2	[10.0]	mg/l	:Zuurstof
WATER BZV1	[5.0]	mg/l	:Snel afbreekbaar BZV5
WATER BZV2	[5.0]	mg/l	:Langzaam afbreekbaar BZV5
WATER NH4	[1.0]	mg/l	:Ammonium
PARM Klmin	[0.1]	m/day	:Min.stofoverdrachtsconstante stromende systemen
PARM TKI	[1.024]	-	:Temperatuurcoefficient stofoverdracht
PARM Kd1	[0.6]	1/dag	:Snelheidsconstante BZV1 afbraak
PARM Kd2	[0.2]	1/dag	:Snelheidsconstante BZV2 afbraak
PARM Vs1	[1.0]	m/dag	:Sedimentatiesnelheid BZV1
PARM Vs2	[0.2]	m/dag	:Sedimentatiesnelheid BZV2
PARM fd1	[1.0]	-	:Fractie opgelost BZV1
PARM fd2	[1.0]	-	:Fractie opgelost BZV2
PARM KO2	[1.0]	mgO2/l	:Monodconstante O2 remming BZV afbraak
PARM TKd	[1.05]	-	:Temperatuurcoefficient BZV afbraak
PARM Knit	[0.1]	1/dag	:Snelheidsconstante nitrificatie
PARM TKnit	[1.05]	-	:Temperatuurcoefficient nitrificatie
PARM KNO2	[2.0]	mgO2/l	:Monodconstante O2 remming nitrificatie
PARM Beta	[0.001]	(gO2/mg Chl)/(W/m2)	:Zuurstofproductie constante
PARM TSZV	[1.060]	-	:Temperatuurcoefficient SZV
PARM OPTKI	[1.0]	-	:Optie stofoverdracht (0=stagnant 1=stromend)
XT T	[20.0]	oC	:Watertemperatuur
XT SBZV1	[0.0]	g/m2.dag	:Diffuse belasting BZV1
XT SBZV2	[0.0]	g/m2.dag	:Diffuse belasting BZV2
XT SNH4	[0.0]	g/m2.dag	:Diffuse belasting NH4
XT I0	[0.00]	W/m2	:Instraling [PAR] wateroppervlak
XT A	[50.0]	ug Chl/l	:Algenbiomassa
XT SZV	[1.0]	g/m2.dag	:Sedimentzuurstofverbruik
XT W	[0.0]	m/s	:Windsnelheid
FLOW Q	[0.0]	m3/s	:Debiet
FLOW As	[20.0]	m2	:Stroomvoerende doorsnede
FLOW Z	[1.0]	m	:Waterdiepte

```

{
U=ABS(Q/As);
OS=14.652-0.41022*T+0.007991*T*T-0.000077774*T*T*T;
IF (OPTKI==0)
  {Kl20=0.0864*(8.43*W^0.5-3.67*W+0.43*W*W);}
IF (W<1.82)
  {Kl20=0.37+0.09*W;}
IF (OPTKI==1)
  {Kl20=2.33*U^0.67*Z^(-0.85);}
IF (Kl20 < Klmin)
  {Kl20=Klmin;}

```

$$\text{KIT} = \text{KI20} * \text{TKI} ^ (T-20);$$
$$\text{KA} = \text{KIT}/Z;$$

$$\text{BZV1U} = \text{BZV1}/(1-\text{EXP}(-\text{Kd1}*5));$$
$$\text{BZV2U} = \text{BZV2}/(1-\text{EXP}(-\text{Kd2}*5));$$

$$\text{PO2} = \text{Beta}*I0*A;$$
$$\text{SedO2} = -\text{SZV}*TSZV ^ (T-20)/Z;$$
$$\text{REAR} = \text{KA}*(\text{OS}-\text{O2});$$
$$\text{Nitrif} = -4.57*\text{Knit}*NH4*\text{TKnit} ^ (T-20)*\text{O2}/(\text{O2} + \text{KNO2});$$

$$\text{BZVox} = -\text{Kd1}*BZV1U*\text{TKd} ^ (T-20)*\text{O2}/(\text{O2} + \text{KO2}) - \text{Kd2}*BZV2U*\text{TKd} ^ (T-20)*\text{O2}/(\text{O2} + \text{KO2});$$

$$k1(\text{O2}) = -\text{KA};$$
$$k0(\text{O2}) = \text{KA}*\text{OS} + \text{PO2} + \text{SedO2} + \text{BZVox} + \text{Nitrif};$$
$$k1(\text{BZV1}) = -\text{Vs1}*(1-\text{fd1})/Z - \text{Kd1}*\text{TKd} ^ (T-20)*\text{O2}/(\text{O2} + \text{KO2});$$
$$k0(\text{BZV1}) = \text{SBZV1}/Z;$$
$$k1(\text{BZV2}) = -\text{Vs2}*(1-\text{fd2})/Z - \text{Kd2}*\text{TKd} ^ (T-20)*\text{O2}/(\text{O2} + \text{KO2});$$
$$k0(\text{BZV2}) = \text{SBZV2}/Z;$$
$$k1(\text{NH4}) = -\text{Knit}*\text{TKnit} ^ (T-20)*\text{O2}/(\text{O2} + \text{KNO2});$$
$$k0(\text{NH4}) = \text{SNH4}/Z;$$

$$\text{BZV5} = \text{BZV1} + \text{BZV2};$$

}

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Slibstroom

een slibtransportmodel voor stromende wateren

hoofdstuk

4

september 1996

G.Blom
J.Icke

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

4

Inhoudsopgave

Vooraf

4.1 Slibtransport in stromende wateren 5

4.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5

4.2 Procesbeschrijvingen 6

4.2.1 Theoretische achtergrond 6

4.2.2 Modelbeschrijving 9

4.3 Benodigde invoer 11

4.3.1 Initiële condities 11

4.3.2 Randvoorwaarden 12

4.3.3 Parameters 12

4.3.4 Externe variabelen 13

4.4 Voorbeeld Mark en Dintel 13

4.4.1 Situatieschets 13

4.4.2 DUFLOW invoer 14

4.4.3 Resultaten 16

Literatuur 20

Bijlagen

Bijlage 1 *Procesbeschrijvingen slibtransport in stromende wateren (SLIBSTROOM) 21*

Bijlage 2 *Het netwerk 23*

Vooraf

Het in deze handleiding beschreven model SLIBSTROOM is grotendeels gebaseerd op het door Anouk Blauw, bij het Hoogheemraadschap West Brabant, in nauwe samenwerking met de Landbouwniversiteit Wageningen, ontwikkelde slibtransportmodel voor het Mark-Vliet systeem (DIGRES). Ook het in deze handleiding beschreven voorbeeld voor de Mark is ontleend aan deze studie.

4.1 Slibtransport in stromende wateren

De beheerders van rivieren, beken en kanalen worden al van oudsher geconfronteerd met de gevolgen van slib- en zandtransport in deze wateren. In het verleden kwam de aandacht van waterbeheerders voor slibtransport vooral voort uit hun taak watergangen op de voor de benodigde afvoercapaciteit of de scheepvaart gewenste diepte te houden. In de afgelopen decennia is er ook vanuit het waterkwaliteitsbeheer grote belangstelling voor slibtransport in stromende wateren ontstaan. Dit hangt vooral samen met het feit dat veel verontreinigingen een sterke neiging hebben zich aan in het water voorkomende slibdeeltjes te binden. Dit heeft er (vanzelfsprekend in combinatie met een overmatige belasting van watersystemen) toe geleid dat met name in de langzamer stromende delen van veel rivieren, beken en kanalen zich soms grote hoeveelheden verontreinigd slib hebben afgezet.

Een volledige beschrijving van het slib- en zandtransport in stromende wateren is zeer complex. De grote variatie in stroomsnelheden die kan optreden in stromende wateren zorgt ervoor dat niet alleen de hoeveelheid sediment die in omloop is sterk kan variëren, maar ook dat een breed scala aan deeltjes getransporteerd kan worden. Deeltjes waarvan de relevante eigenschappen sterk kunnen verschillen. Het is niet mogelijk dit alles in een betrekkelijk eenvoudig model binnen DUFLOW te beschrijven. Het hier beschreven model beschrijft alleen het transport van slib (deeltjes met een diameter van 0,45 - 63 μm). Alleen het zogenaamde 'suspended-load' transport wordt beschreven, d.w.z. het transport van deeltjes die volledig in suspensie gaan. In hoofdstuk 4.2.1, waarin de theoretische achtergronden worden besproken, wordt hierop nader ingegaan.

Zelfs met de bovenstaande beperking blijft de variatie in deeltjes-groottes en sedimentatiesnelheden in ruimte en tijd in veel stromende wateren heel groot. Daarmee kan op verschillende manieren omgegaan worden. In dit model is ervoor gekozen twee opties aan te bieden. Met de eerste optie kan het gedrag van slib met een vaste bekende valsnelheid worden beschreven. Deze optie kan bijvoorbeeld gebruikt worden voor het beschrijven van fijn slib. Een alternatieve mogelijkheid die geboden wordt, is de valsnelheid afhankelijk te maken van de slibconcentratie. Daarmee wordt rekening gehouden met het feit dat bij hogere stroomsnelheden vaak grotere deeltjes opgewerveld zijn – en dat er dus een hogere valsnelheid geldt. Met deze optie wordt de zwevende stofconcentratie in stromende systemen vaak beter beschreven.

4.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen

Situaties waarin het simuleren van slibtransport van belang kan zijn, zijn onder meer:

- studies gericht op het berekenen van de verspreiding van slib, met daaraan gebonden verontreinigingen. Bijvoorbeeld in situaties waar slibrijk water wordt ingelaten of lozingen slib in het water brengen;
- gevallen waarin mogelijk verspreiding van verontreinigd waterbodemmateriaal kan plaatsvinden door erosie onder invloed van de stroming;

Maatregelen die het gedrag en transport van slib in rivieren, beken en kanalen kunnen beïnvloeden en waarvoor simulatieberekeningen met een slibtransportmodel nuttig kunnen zijn, zijn onder meer:

- veranderingen in de waterhuishouding, zoals een beperking van het inlaten van slibrijk water;
- het aanleggen van slibvangen om verdere verspreiding van verontreinigd slib tegen te gaan.

Het model beperkt zich tot stromende systemen. Er wordt geen rekening gehouden met transport van sediment door bed-load. Ook wordt in het model de invloed van scheepvaart niet in rekening gebracht. Voor systemen, waarin opwerveling door schepen een belangrijke rol speelt is het model dan ook niet geschikt.

4.2 Procesbeschrijvingen

De drijvende kracht achter sedimenttransport in open waterlopen is de schuifkracht die het stromende water uitoefent op de sliblaag op de bodem. Sedimenttransport kan onderverdeeld worden in drie categorieën:

- bed-load: de sedimentdeeltjes springen en rollen over de bodem;
- suspended-load: sediment wordt opgewerveld van de bodem en verblijft enige tijd in het water alvorens het sedimenteert. Tijdens het verblijf in het water wordt het slib getransporteerd;
- wash-load: dit betreft gesuspenseerd slib dat nooit sedimenteert en altijd in het water aanwezig blijft. Dit wordt ook wel de achtergrondconcentratie zwevende stof genoemd.

4.2.1 Theoretische achtergrond

In de literatuur over sedimenttransport worden tal van formuleringen gevonden die suspended load en bed load samen (= totaal transport) of gescheiden beschrijven. De uitdrukkingen hebben vaak een sterk empirisch karakter en een beperkt geldingsgebied. De complexiteit van de diverse modellen verschilt eveneens sterk. In tabel 4.1 wordt een overzicht gegeven van verschillende methoden (Vanoni, 1975, Brownlie, 1981, van Rijn, 1984,a,b,c).

In de besproken DUFLOW toepassing wordt alleen gerekend aan suspended load. Hierop zijn de vergelijkingen van Krone en Partheniades van toepassing. Het is in DUFLOW niet mogelijk om te rekenen aan bedload, omdat het horizontaal transport van bodemmateriaal niet gesimuleerd kan worden.

Het transport van zwevende stof hangt nauw samen met de waterstroming. Door de waterstroming wordt het slib op de bodem in suspensie gebracht en met het water meegevoerd. De eendimensionale vergelijking voor het transport van slib in het water wordt gegeven door:

$$[1] \quad \frac{\partial Z \cdot SS_1}{\partial t} + \frac{\partial Z \cdot u \cdot SS_1}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (Z \cdot D \cdot \frac{\partial SS_1}{\partial x}) - \Phi_{res} + \Phi_{sed} = 0$$

waarin: Z waterdiepte (m)
 SS₁ concentratie zwevende stof (g.m⁻³)

- U stroomsnelheid in de x-richting ($m \cdot s^{-1}$)
 D dispersieconstante in de x-richting ($m^2 \cdot s^{-1}$)
 Φ_{res} resuspensieflux ($g \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$)
 Φ_{sed} sedimentatieflux ($g \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$)

Tabel 4.1 Literatuuroverzicht van sedimenttransportformules

Auteur(s)	Transportformule	Korrelgrootte	Opmerkingen
Ackers & White (1973)	t^*	0,04 - 0,40	temperatuurgevoelig via viscositeit
Brownlie (1981)	t	0,062 - 2,0	validatie niet gebaseerd op onafhankelijke gegevens; zandtransport
Engelund & Hansen (1967)	t	0,19 - 0,93	simpele methode; zandtransport
Karim & Kennedy (1983)	$t(=b^*+s^*)$		totaal transport gebaseerd op zand- en slibtransport
Krone (1962)	s		sedimentatie zwevende stof; eenvoudige formules
Laursen (1958)	t	0,011 - 4,08	verdeling in fracties met gemiddelde diameter en en valsnelheid
Meyer-Peter & Müller (1948)	t	0,40 - 30	geldigheidsgebied beperkt tot lage transporten; zandtransport
Partheniades (1965)	s		resuspensie/erosie zwevende stof; eenvoudige formules
van Rijn (1984)	$b/s/t$	0,2 - 2,0 0,1 - 0,5	eenvoudige benadering, slechts toepasbaar voor zandtransport
Toffaletti (1968)	$t(=b+s)$	0,3 - 0,93	onderverdeling van gesuspendeerde zone; zandtransport; totaal transport gebaseerd op zand- en zwevend transport
Zanke (1982)	$t(=b+s)$	max 2,0	totaal transport gebaseerd op zand- en slibtransport

*b = bed-load, s = suspended-load, t = totaal

In het model SLIBSTROOM worden voor resuspensie en sedimentatie de vergelijkingen van Krone en Partheniades gebruikt. Resuspensie en sedimentatie treden niet gelijktijdig op en zijn afhankelijk van de schuifspanning die het water op de bodem uitoefent. In een traject met een toenemende bodemschuifspanning treedt allereerst sedimentatie op; vervolgens blijft de concentratie in het water enige tijd constant en is er geen resuspensie of sedimentatie. Bij nog hogere schuifspanningen treedt er resuspensie op. In formules:

$$[2] \quad \text{Als } \tau < \tau_{sed}: \quad \begin{aligned} \Phi_{sed} &= Ws \cdot \left(1 - \frac{\tau}{\tau_{sed}}\right) \cdot SS_1 \\ \Phi_{res} &= 0 \end{aligned}$$

$$[3] \quad \text{Als } \tau_{sed} \leq \tau < \tau_{res}: \quad \begin{aligned} \Phi_{sed} &= 0 \\ \Phi_{res} &= 0 \end{aligned}$$

$$[4] \quad \text{Als } \tau \geq \tau_{\text{res}}: \quad \begin{aligned} \Phi_{\text{sed}} &= 0 \\ \Phi_{\text{res}} &= M \cdot \left(\frac{\tau}{\tau_{\text{res}}} - 1 \right) \end{aligned}$$

waarin: τ schuifspanning aan de bodem (Pa)
 W_s valsnelheid zwevende stof ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)
 τ_{sed} kritische bodemschuifspanning voor sedimentatie (Pa)
 τ_{res} kritische bodemschuifspanning voor resuspensie (Pa)
 M evenredigheidsconstante voor resuspensie ($\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

De bodemschuifspanning is een functie van de schuifspanningssnelheid U_* van het water over de bodem:

$$[5] \quad \tau = \rho_w \cdot U_*^2$$

De schuifspanningssnelheid aan de bodem volgt uit vergelijking:

$$[6] \quad U_* = \sqrt{g \cdot Z \cdot S}$$

waarin: g valversnelling (m/s^2)
 S bodemverhang (-)

Vullen we hier de vergelijking voor eenparige stroming in waterlopen voor in, de Chézy vergelijking, dan volgt hieruit voor U_* :

$$[7] \quad U_* = \frac{|u| \sqrt{g}}{C}$$

waarin: C Chézycoëfficiënt ($\text{m}^{-1/2} \cdot \text{s}^{-1}$)

De valsnelheid van een deeltje is afhankelijk van de dichtheid, afmeting en vorm. Voor de eenparige valsnelheid van een rond deeltje ($< 100 \mu\text{m}$) geldt de vergelijking van Stokes:

$$[8] \quad W_s = \frac{1}{18} \cdot \frac{1}{\nu} \cdot \frac{\rho_s - \rho}{\rho} \cdot g \cdot d_s^2$$

waarin: ν kinematische viscositeit ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)
 ρ dichtheid water ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
 ρ_s dichtheid slibdeeltje ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
 d_s diameter slibdeeltje (m)

In hoge concentraties kunnen de deeltjes elkaar hinderen of coaguleren tijdens de sedimentatie.

Het sediment in natuurlijke systemen is niet homogeen van samenstelling. Het sediment is een mengsel van deeltjes met variërende resuspensie- en sedimentatie karakteristieken. Voor het beschrijven van de resuspensie en sedimentatie eigenschappen van een dergelijk slibmengsel zijn twee manieren van aanpak mogelijk.

De eerste methode gaat uit van een indeling op basis van goed gedefinieerde slibfracties. Van elke fractie afzonderlijk zijn de parameters met betrekking tot resuspensie

en sedimentatie bekend. Deze aanpak wordt gebruikt in systemen waar de eigenschappen van het slib binnen nauwe grenzen vallen, waardoor het mogelijk is om door middel van enkele fracties het transport van slib vrij volledig te beschrijven. De fracties worden onderscheiden op basis van valsnelheidsverschillen, die met een eenvoudig experiment vast te stellen zijn. In veel meren is het sediment relatief homogeen van samenstelling en wordt deze methode gebruikt. Ook voor het volgen van één slibfractie door het systeem kunnen constante eigenschappen verondersteld worden. Op deze manier kan bijvoorbeeld het gedrag van een geloosde slibfractie in het watersysteem gesimuleerd worden.

In beken, rivieren en kanalen kunnen grote variaties in valsnelheid en resuspensie karakteristiek optreden. Dat heeft o.a. te maken met de veel hogere stroomsnelheden die er in vergelijking met meren optreden en de aanvoer van materiaal van bovenstrooms. Voor de beschrijvingen van dergelijke systemen wordt wel gebruik gemaakt van een methode, waarbij de valsnelheid een functie is van de concentratie zwevende stof. Op deze wijze wordt gesimuleerd dat bij hoge concentraties het aandeel grote snel bezinkbare deeltjes groter is.

In het beschreven model wordt de valsnelheid evenredig met de derde macht van de concentratie zwevende stof verondersteld. Er geldt:

$$[9] \quad W_s = 8 W_m \left(\frac{SS_1}{SS_0} \right)^3$$

waarin: SS_0 initiële concentratie valsnelheidsproef ($\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)
(zie ook paragraaf 4.3)
 W_m mediane valsnelheid ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)

Er kleeft een (theoretisch) bezwaar aan deze 'spectrale' aanpak. Er wordt een continue variatie in de valsnelheid verondersteld, terwijl de erosiesnelheid en de kritische schuifspanningen voor resuspensie en sedimentatie constant blijven. Deze parameters zouden eveneens continu met de concentratie zwevende stof en de slibvoorraad op de bodem moeten variëren. In de praktijk blijkt echter dat goede resultaten worden verkregen indien alleen de valsnelheid varieert.

4.2.2 Modelbeschrijving

Het slibtransportmodel biedt de keuze uit twee modellen:

- het ene voor het simuleren van de resuspensie/sedimentatie van 'natuurlijk' bodemslib;
- het andere voor het uitvoeren van berekeningen aan een relatief nauwkeurig omschreven slibsoort.

Beide modellen maken voor de berekening van suspended load gebruik van de vergelijkingen van Krone en Partheniades. Het verschil zit in de benadering van de valsnelheid:

- in model 1 wordt gerekend met een variërende valsnelheidsverdeling. De valsnelheid is een functie van het zwevende stof gehalte;
- in model 2 wordt gerekend met een constante valsnelheid.

Beide modellen zijn opgenomen in één DUFLOW-kwaliteitsmodel. De keuze voor het te gebruiken model wordt gemaakt met behulp van de parameter 'model'. In bijlage 1 is een listing opgenomen van het model in DUPROL-code.

In het model worden de schuifspanningssnelheid en de bodemschuifspanning berekend volgens vergelijking 5 en 7, waarbij de stroomsnelheid wordt berekend als:

$$[10] \quad U = \frac{Q}{A_s}$$

waarin: Q debiet ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)
 A_s natte doorsnede (m^2)

Afhankelijk van de modelkeuze wordt de valsnelheid berekend als

$$[11] \quad W_s = 8W_m \frac{SS_1^3}{SS_0^3} \quad \text{voor model 1 of als:}$$

$$[12] \quad W_s = W_c \quad \text{voor model 2.}$$

W_c is in dat geval een constante door de gebruiker op te geven valsnelheid.

De berekende schuifspanning en valsnelheid worden gebruikt om de sedimentatie- en potentiële resuspensieflux te berekenen volgens vergelijking 2, 3 en 4. Er wordt gesproken van een potentiële resuspensieflux, omdat in principe na enige tijd de voorraad aan resuspenbaar materiaal op de bodem uitgeput kan raken. In dat geval wordt de resuspensieflux gelijk aan:

$$[13] \quad \Phi_{res} = \frac{SS_{bod}}{dt}$$

Waarin SS_{bod} de concentratie slib is op de bodem uitgedrukt per m^2 . In het model wordt de dikte van de sliblaag op de bodem niet berekend. Er wordt gewerkt met een hoeveelheid slib per m^2 . Om de hoeveelheid slib op de bodem bij te houden wordt de volgende balans bijgehouden:

$$[14] \quad \frac{dSS_{bod}}{dt} = (\Phi_{sed} - \Phi_{res})$$

Er bestaat de mogelijkheid in het model een achtergrondconcentratie SS op te geven, die de wash-load representeert. Deze concentratie wordt opgeteld bij de berekende zwevende stof concentratie en kan als functie worden uitgevoerd.

$$SS = SS_a + SS_1$$

4.3 Benodigde invoer

Op de benodigde invoer voor het opbouwen van een stromingsnetwerk wordt hier niet ingegaan. Hiervoor wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding.

Voor het berekenen van slibtransport in een netwerk van open waterlopen zijn de volgende gegevens noodzakelijk:

- informatie over de waterlopen ten behoeve van de schematisering;
- initiële condities van slibvoorraad in water en bodem, waterpeilen en debieten;
- randvoorwaarden met betrekking tot de aan- en afvoer van water en slib;
- parameterwaarden voor resuspensie en sedimentatie;
- dispersiecoëfficiënten.

Tabel 4.2 geeft een overzicht van de benodigde invoervariabelen van het kwaliteitsmodel.

Tabel 4.2 Benodigde invoer model SLIBSTROOM

Type	Naam		Bron
Initiële conditie	SS ₁	Waterkolom	Meting/new initial conditions
	SS _{bod}	Sediment	Meting/schatting
Randvoorwaarden	SS ₁	Systeemgrens	Meting/schatting
	SS ₁	Puntlozingen	Meting/schatting
Parameters	W _m	Mediane valsnelheid	Valsnelheidsproef
	SS ₀	Initiële concentratie	
		valsnelheidsproef	Valsnelheidsproef
	W _c	Constante valsnelheid	Valsnelheidsproef
	t _{res}	kritische schuifspanning	
		resuspensie	Literatuur/kalibratie
	t _{sed}	kritische schuifspanning	
sedimentatie		Literatuur/kalibratie	
M	Resuspensie constante	Literatuur/kalibratie	
model	Optie model keuze	Keuze gebruiker	
dt	Tijdstap	Calculation settings	
Externe variabelen	D	Dispersieconstante	Zie hoofdstuk 1.3.4
	SS _a	Achtergrondconcentratie	Meting
	C	Chézyconstante	Object properties cross sections

4.3.1 Initiële condities

De initiële concentratie slib in het water kan verkregen worden door met het model een berekening uit te voeren voor de dag voorafgaand aan de simulatieperiode. Met de optie 'new initial conditions' kunnen de simulatieresultaten omschreven worden naar initiële condities.

De slibvoorraad op de bodem kan in het veld gemeten worden door het nemen van bodemmonsters. In kleine, ondiepe wateren zoals beken kan men bodemkolommen steken met een puls. De slibdikte kan dan visueel en experimenteel vastgesteld worden. Experimenteel kan dat als volgt: de sliblaag van de bodem wordt in suspensie gebracht; het drooggewicht van de suspensie gedeeld door de oppervlakte van de kolom is een maat voor de slibvoorraad op de bodem.

4.3.2 Randvoorwaarden

Naast de belangrijkste aanvoerdebieten en peil-randvoorwaarden zijn hier ook de lozingen door rioolwaterzuiveringsinstallaties en andere slibbronnen van belang. Op elk punt waar water wordt ingelaten dient tevens de concentratie zwevende stof als randvoorwaarde opgegeven te worden.

4.3.3 Parameters

Voor het bepalen van de valsnelheid kan men gebruik maken van een valsnelheidsproef. Sediment wordt in een maatcilinder in suspensie wordt gebracht, waarna men de deeltjes laat bezinken. Vervolgens worden op vaste tijdstippen monsters genomen van de suspensie op een bekende hoogte boven de onderzijde van de maatcilinder. Indien de concentratie zwevende stof de helft van de initiële concentratie SS_0 bedraagt, wordt de mediane valsnelheid W_m bepaald uit de afstand die de deeltjes in het tijdsinterval hebben afgelegd (Van Duin, 1992). Indien men met een homogene slibsoort werkt, kan men voor de valsnelheid W_c aannemen dat deze gelijk is aan de mediane valsnelheid W_m .

De overige modelparameters kunnen op verschillende manieren verkregen worden. Indicaties over de waarden van deze parameters in vergelijkbare watersystemen zijn beschreven in literatuur over sedimenttransport. In deze literatuur is het onderscheid tussen bodemtransport en suspended load niet altijd aanwezig.

Een andere aanpak is de combinatie veldwerk-modelkalibratie. Daartoe worden op een aantal karakteristieke plaatsen in het systeem de zwevende-stofconcentraties gemeten. Men dient tevens de beschikking te hebben over de debieten en waterstanden tijdens dezelfde periode alsmede de geloosde hoeveelheden zwevende stof. Vervolgens kan men de modelparameters door kalibratie vaststellen.

Bij instituten als het Waterloopkundig Laboratorium kan men experimentele bepalingen van resuspensie-/erosiekaracteristieken van sedimenten laten uitvoeren. Tabel 4.3 geeft een overzicht van typische waarden voor een aantal verschillende systemen.

Tabel 4.3 Parameterwaarden voor resuspensie/sedimentatie in enkele waterlopen en estuaria.

Locatie	W_m (m/d)	T_{sed} (Pa)	T_{res} (Pa)	M (g/m ² ,d)
Eems/Dollard Delfzijl	121 - 492	0,02 - 0,04	0,15	$0,86 \cdot 10^3 - 8,6 \cdot 10^3$
Westerschelde Breskens	20,0	0,05 - 0,07	0,20 - 0,30	$17,3 \cdot 10^3 - 25,9 \cdot 10^3$
Hollandsch diep Moerdijk	8,6	0,07 - 0,09	0,20 - 0,45	$8,64 \cdot 10^3 - 43,2 \cdot 10^3$
Ketelmeer	4,3	0,07 - 0,09	0,10 - 0,30	$8,6 \cdot 10^3 - 34,6 \cdot 10^3$
Hollandsch diep Sassendiep	17,3	0,09 - 0,11	0,45 - 0,50	$17,2 \cdot 10^3 - 34,6 \cdot 10^3$
Mark- Vliet	70,0	0,30	0,60	$4,3 \cdot 10^3$
Maas Belfeld	51,8	0,05 - 0,07	0,50	$0,86 \cdot 10^3 - 8,6 \cdot 10^3$

Voor de parameter model, bepalend voor de valsnelheidsvergelijking die wordt gebruikt, geldt:

Model = 1: er wordt gerekend met een continue valsnelheidsverdeling;

Model = 2: er wordt gerekend met een constante valsnelheid.

De parameter dt heeft betrekking op de tijdstap waarmee het kwaliteitsmodel wordt doorgerekend. Deze tijdstap wordt in het model gebruikt om na te gaan of er in één tijdstap niet meer wordt opgewerveld dan de aanwezige slibvoorraad op de bodem. De waarde van deze parameters dient gelijk te zijn aan de tijdstap waarmee de kwaliteitsberekening wordt uitgevoerd.

4.3.4 Externe variabelen

De achtergrondconcentratie zwevende stof kan bepaald worden met behulp van een watermonster, waarvan men het drooggewicht bepaalt nadat het slib in het monster meerdere uren heeft kunnen bezinken.

De dispersiecoëfficiënt is een maat voor de afvlakking van concentratiegradienten ten gevolge van turbulentie en stroomsnelheidsverschillen. Voor een overzicht van typische waarden voor de dispersiecoëfficiënt wordt verwezen naar hoofdstuk 1.3.

De Chézyconstante wordt ook voor het berekenen van de stroming gebruikt en wordt opgegeven bij de eigenschappen van de cross sections van het netwerk. Deze moet in dit kwaliteitsmodel opnieuw worden opgegeven.

4.4 Voorbeeld Mark en Dintel

Er is een voorbeeld uitgewerkt voor een gedeelte van het Mark-Vlietsysteem: de Mark en de Dintel. Het Mark-Vliet systeem valt binnen het beheersgebied van het Hoogheemraadschap van West-Brabant. In het systeem treedt resuspensie van bodemslib op onder invloed van de waterstroming. Tevens wordt er water met zwevende stof geloosd op het systeem. Een van de onderzoeks-vragen waarvoor het model is ontwikkeld, is op welke plaatsen in het systeem slib zich ophoopt, en hoeveel slib er geloosd wordt op het Volkerak-Zoommeer.

4.4.1 Situatieschets

De bodem van het gebied bestaat uit kleigrond. Het water in het systeem is grotendeels afkomstig uit de ten zuiden van de steden Roosendaal en Breda gelegen zandgebieden. In de waterlopen in het kleigebied is het waterpeil meestal NAP. De polders in dit gebied wateren af via gemalen. Deze gemalen lozen op de Mark, Dintel en de Roosendaalse en Steenbergse Vliet. Verder wordt er in dit gebied water geloosd door vaarten, rioolwaterzuiveringen en twee suikerfabrieken. Uiteindelijk komt het water uit het Mark-Vliet systeem via de Dintelsas of via de Benedensas terecht in het Volkerak-Zoommeer.

Er zijn berekeningen gemaakt voor twee situaties:

- de zwevende stofconcentraties tijdens een afvoergolf. Aangenomen wordt dat het gesuspendeerd bodemslib betreft met een continue valsnelheidsverdeling, daarom wordt er gerekend met slibmodel 1 (dms file Mark1);
- het gedrag van slib dat door een (hypothetische) zuiveringsinstallatie van een grote stad wordt geloosd tijdens dezelfde afvoergolf. Van het slib zijn de eigenschappen bekend, zodat er met een constante valsnelheid gerekend kan worden en slibmodel 2 toegepast kan worden (dms file Mark2).

4.4.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

Het netwerk vormt een vereenvoudigd onderdeel van het model DIGRES. (Meulenbroek, 1994). Van dit model zijn de bovenlopen (deelmodellen 'ROOS', 'BREDA' en 'AA') afgekoppeld. Tevens zijn enkele aanvoerende kanalen losgekoppeld; de debieten en slibconcentraties zijn als randvoorwaarde aan het systeem opgelegd. Het model bestaat uit lange waterlopen, onderbroken door diverse kunstwerken. In bijlage 1 is de (bijgewerkte) kaart opgenomen van het gebruikte onderdeel uit het model DIGRES.

Om het netwerk voor DUFLOW voor Windows geschikt te maken, dienen aan de knopen coördinaten te worden toegevoegd. Wanneer aan de knopen geen coördinaten worden toegekend, vallen deze namelijk samen doordat overal $(X,Y) = (0,0)$ verschijnt.

Daarnaast is het niet mogelijk om meerdere debieten als randvoorwaarde aan één knoop te verbinden. Dit probleem is op te lossen door de debieten op één knoop te sommeren (dit is gebeurd bij knoop 31) of door in de nabijheid van de betreffende knoop één of meerdere lozingspunten te leggen, zoals is gebeurd in de nabijheid van knoop 38.

KWALITEITSMODEL

Het in DUPROL geprogrammeerde slibmodel beschrijft de resuspensie/sedimentatie volgens het model van Krone en Partheniades. Er is keuze uit twee methoden, waarbij naar keuze met een constante of een continu variërende valsnelheid gerekend kan worden. De resuspensie en sedimentatiefluxen zijn begrensd door aanwezige voorraad slib in bodem en water.

INITIËLE CONDITIES

In scenario Mark1 is de initiële concentratie zwevende stof 13 mg.l^{-1} . De slibvoorraad op de bodem is op alle locaties gelijk gesteld op 270 kg.m^{-2} .

In scenario Mark2 is de initiële concentratie zwevende stof 0 mg.l^{-1} en de initiële slibvoorraad op de bodem op alle locaties gelijk aan 0 g.m^{-2} .

RANDVOORWAARDEN

De windrichting werd in de DOS-versie van DUFLOW opgegeven als randvoorwaarde. In deze versie kan de windrichting via een apart onderwerp in het scenario opgegeven worden. In de scenariomanager kan de optie 'wind direction' aangeklikt worden. Er verschijnt dan een 'wind direction' scherm waarin gegevens ingevoerd kunnen worden. Voor dit model zijn gegevens geïmporteerd.

Scenario Mark1: Op plaatsen waar water in- en/of uitgelaten kan worden zijn concentraties zwevende stof als randvoorwaarde opgegeven. Op plaatsen waar water wordt geloosd is dit een constante 'load', op de plaatsen waar water wordt ingelaten zijn het concentraties. Van inlaatwater waarvan de concentratie zwevende stof onbekend is, is een waarde van 13 mg.l^{-1} aangenomen.

Voor de berekening met project scenario Mark2 zijn dezelfde boundary conditions voor de waterbeweging opgelegd als in project scenario Mark1. De concentraties zwevende stof van het inlaatwater zijn gelijkgesteld aan 0 mg.l^{-1} . Er is een fictieve zuiveringsinstallatie geplaatst ter hoogte van knoop 72. Deze loost met een debiet van $0,15 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$ een afvalwater met een zwevende-stofgehalte van 100 mg.l^{-1} .

EXTERNE VARIABELEN

De Chézycoëfficiënt aan de bodem is als externe variabele ingevoerd. De Chézycoëfficiënt wordt gebruikt voor de berekening van de schuifspanning aan de bodem.

De achtergrondconcentratie zwevende stof SS_a is constant verondersteld op 5 mg.l^{-1} . Eventueel kan deze fluctueren in de tijd ten gevolge van bijvoorbeeld algengroei.

PARAMETERS

Voor project SLIBSTROOM zijn de parameters gebruikt die zijn vastgesteld voor het gebruikte netwerkonderdeel van het model DIGRES (Blauw, 1995).

Voor project SLIBSTROOM 2 is aangenomen dat het slib uit de zuiveringsinstallatie dezelfde eigenschappen heeft als het Ketelmeerslib (tabel 4.3).

FLOW VARIABLEN

De flowvariabelen Q (gemiddeld debiet) en A (natte doorsnede) worden gebruikt voor het berekenen van de gemiddelde stroomsnelheid U .

CALCULATION SETTINGS

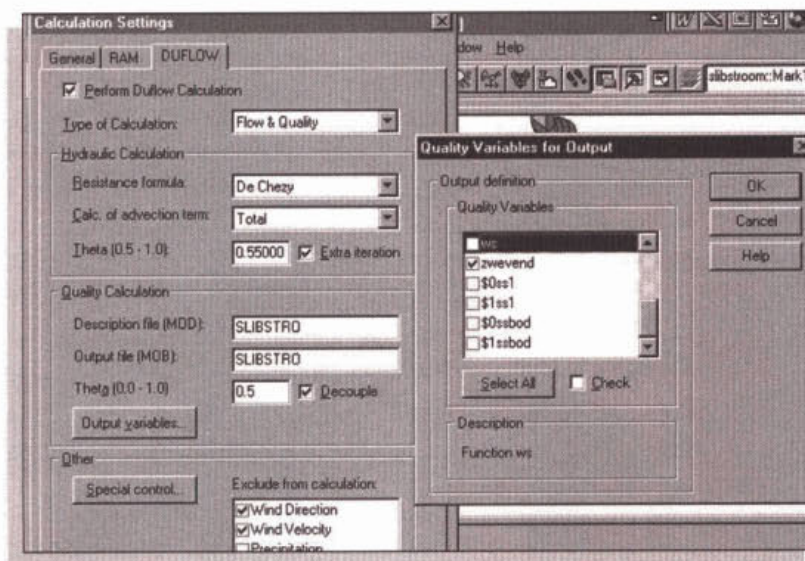
De tijdstap voor stroming en kwaliteit bedraagt 15 minuten. De Theta-waarde voor stroming is 0,55, die voor de kwaliteitsberekeningen is 0,50.

Alle kwaliteitsvariabelen worden uitgevoerd, evenals de functies 'zwevend', 'resuspensie' en 'sedimentatie'. Het is mogelijk om deze functies voor uitvoer te selecteren via het 'scenario' menu, optie 'calculation settings'. Onder de DufLOW tab is een optie 'quality variables for output' opgenomen, waarin ook functies kunnen worden aangevinkt (figuur 4.1).

Tabel 4.4 Gebruikte parameterwaarden voor de simulaties met het slibmodel in het Mark-Vlietsysteem.

Model	W_s (m.d ⁻¹)	W_m (m.d ⁻¹)	C_0 (g.m ⁻³)	τ_{sed} (Pa)	τ_{res} (Pa)	M (g.m ⁻² .d ⁻¹)
1	n.v.t.	70,0	70,0	0,30	0,60	4320
2	4,3	n.v.t.	n.v.t.	0,08	0,25	21600

Figuur 4.1 Scherm 'quality variables for output'

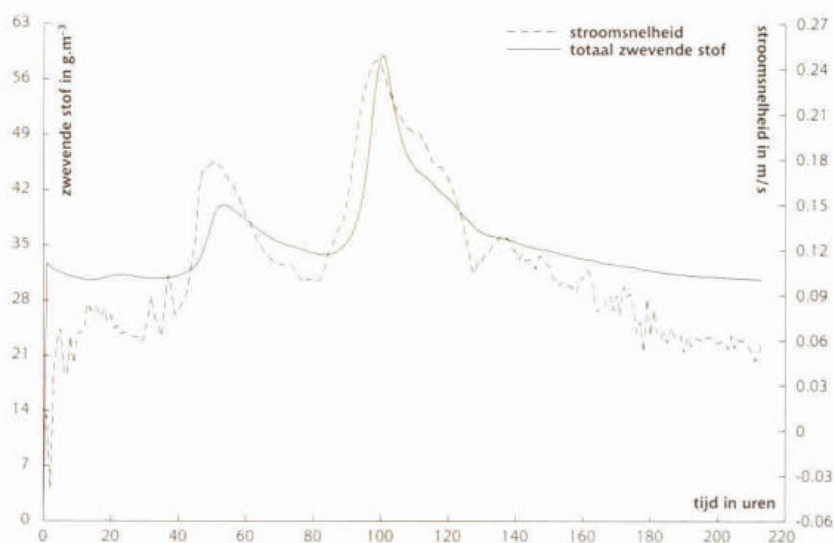


4.4.3 Resultaten

MODEL I: CONTINUE VALSNELHEIDSVERDELING

Er is een simulatie uitgevoerd voor de periode van 18-12-91 t/m 26-12-91. Van deze periode waren afvoergegevens beschikbaar, alsmede enkele meetgegevens voor het zwevende stofgehalte. In deze periode komt een hoge afvoerpiek voor, waardoor bovenstrooms veel slib wordt opgewerveld en overgestort. Dit slib komt gaandeweg tot bezinking in het Mark-Vlietsysteem. In figuur 4.2 is de concentratie zwevende stof uitgezet alsmede de stroomsnelheid in een willekeurige plaats in het systeem (sectie 36).

Figuur 4.2 Concentratie totaal zwevende stof SS en stroomsnelheid in sectie 36



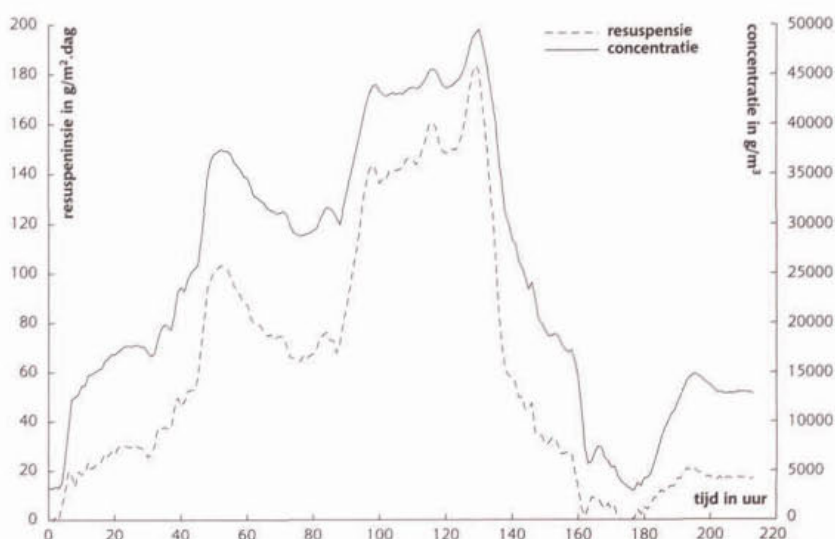
Uit deze figuur blijkt duidelijk dat de concentratie zwevende stof in het water hoger is naarmate de stroomsnelheid hoger is. Wat we in deze sectie waarnemen is echter niet het lokaal opgewervelde slib, maar de restanten van de zwevende stof die afkomstig zijn vanuit de bovenstrooms gelegen delen van de beek. De zwaardere slibdeeltjes bezinken snel, omdat de valsnelheid evenredig is met de concentratie zwevende stof tot de derde macht. In deze stroomafwaarts gelegen sectie domineert daarom het slib met lage valsnelheden dat met het water wordt meegevoerd. Hoe lager de valsnelheid van het slib, hoe langer de verblijftijd in het water, hoe groter de afstand waarover het slib wordt getransporteerd. In figuur 4.3 wordt dit verduidelijkt, omdat hier de concentratie slib alsook de valsnelheid over de hele lengte van het Mark-Vliet systeem zijn uitgezet.

Figuur 4.3 Concentratie zwevende stof SS1 en valsnelheid als functie van de afstand



Aan deze figuur is te zien dat naarmate de concentratie zwevende stof hoger is, de valsnelheid eveneens hoger is. Er wordt materiaal aangevoerd. (te zien links in de figuur), waarvan het merendeel zeer snel bezinkt. In het grootste deel van het systeem treedt geen resuspensie op door de relatief lage stroomsnelheden. In de meest benedenstrooms gelegen secties is de stroomsnelheid zo hoog dat hier wél resuspensie van bodemslib optreedt. De hoge stroomsnelheden benedenstrooms worden veroorzaakt door de zijdelingse toevoer van water langs het traject.

Figuur 4.4 Verloop van de resuspensieflux en de concentratie slib in het water als functie van de tijd in sectie 7 (benedenstrooms gelegen sectie)



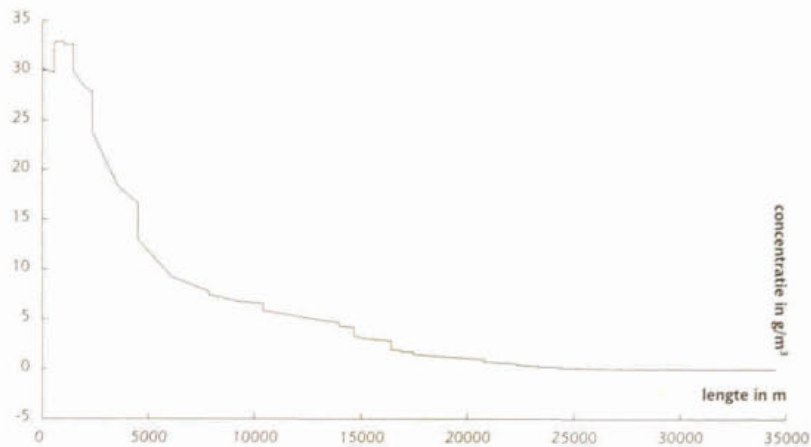
In figuur 4.4 zijn de resuspensieflux en de concentratie slib in het water uitgezet in een benedenstrooms gelegen sectie. Deze figuur illustreert nogmaals dat de concentratie slib in deze sectie onder invloed staat van resuspensie, en de aanvoer van slib bovenstrooms hier van minder belang is.

MODEL 2: CONSTATE VALSNELHEID

In deze simulatie wordt het gedrag van slib gesimuleerd, dat wordt geloosd door een fictieve zuiveringsinstallatie van een grote stad. Het gaat om licht slib, met dezelfde eigenschappen als het Ketelmeerslib in tabel 4.3. Ter hoogte van knoop 72 wordt $0,15 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ gezuiverd afvalwater geloosd met een zwevende stofconcentratie van $100 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$. Deze lozing start aan het begin van de simulatieperiode.

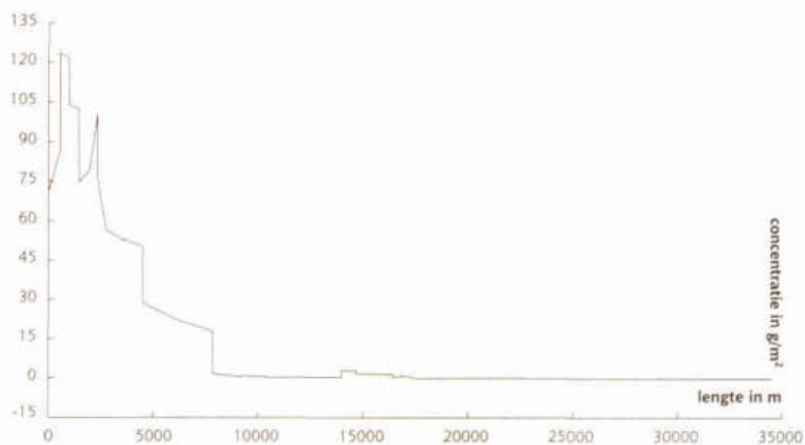
Het is interessant om de situatie vóór en tijdens de afvoergolf de bekijken. In de periode voorafgaand aan de afvoergolf blijkt het slib in de nabijheid van de zuiveringsinstallatie te bezinken. De zwevende stofconcentratie is na 2000 m gedaald van 30 tot onder de $1 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}$.

Figuur 4.5 Concentratie slib in het water voorafgaand aan de afvoergolf.



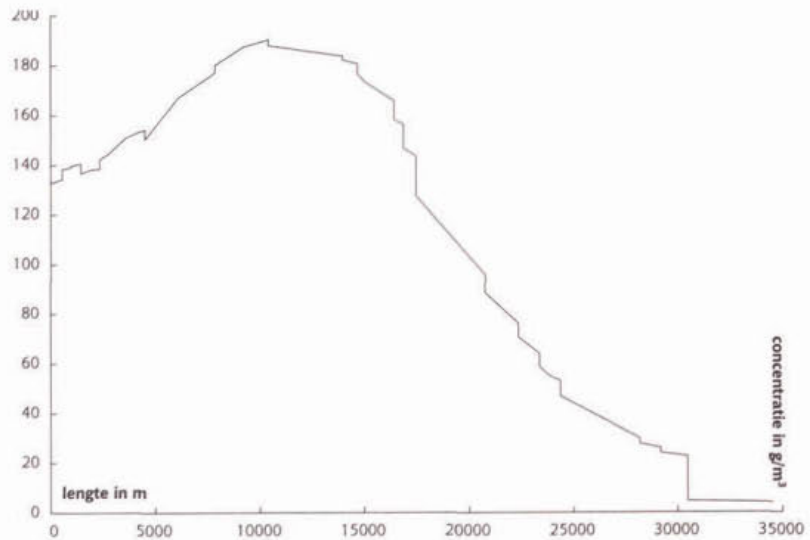
Aan de concentratie slib op de bodem (figuur 4.6) is eveneens duidelijk te zien dat het merendeel van het slib nabij het lozingspunt bezinkt.

Figuur 4.6 Slibvoorraad op de bodem voorafgaand aan de afvoergolf



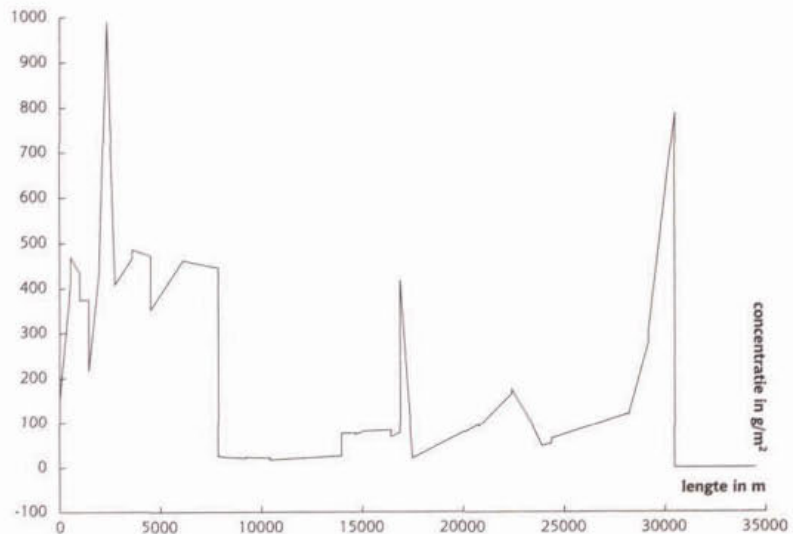
Dit wordt anders indien de stroomsnelheid hoger wordt tijdens een afvoergolf. Slib dat nabij de zuiveringsinstallatie is bezonken komt weer in suspensie. In figuur 4.7 is de concentratie zwevende stof vlak na het hoogtepunt van de afvoergolf uitgezet.

Figuur 4.7 Concentratie slib in het water tijdens de afvoergolf.



Nabij het lozingspunt is een wolk ontstaan van opgewerveld bodemslib die met het water wordt meegevoerd naar benedenstrooms gelegen gebieden alwaar het zal sedimenteren. In figuur 4.7 zien we het transport van deze wolk, waardoor stroomafwaarts tijdelijk een hogere concentratie zwevende stof wordt gesimuleerd dan nabij 'de bron' waar de resuspensieflux al is verminderd. Na afloop van de simulatieperiode wordt dan ook op meerdere plaatsen in het systeem accumulatie van slib op de bodem waargenomen (figuur 4.8).

Figuur 4.8 Slibvoorraad op de bodem aan het einde van de simulatieperiode



Literatuur

- Blauw, A., 1995. Grensoverschrijdende water- en slibmodellering in het Mark-Vliet systeem. Wageningen: Landbouwwuniversiteit, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie. Verslag nr. 016/95. 102 p.
- Brownlie, W.R., 1981. Prediction of flow depth and sediment discharge in open channels, Pasadena: California Institute of Technology. Report No. KH-R-43A. 232 p.
- Duin, E.H.S. van, 1992. Sedimenttransport, light and algal growth in the Markermeer, Wageningen.
- Engelund, F. & E. Hansen, 1967. A monograph on sediment transport in alluvial streams. Copenhagen: Teknisk forlag. 62 p.
- Krone, R.B., 1962. Flume Studies on the transport of Sediment Estuarine Shoaling processes, University of Berkely, Hydr. Eng., Laboratory.
- Meulenbroek, P., 1994. Aanzet tot grensoverschrijdende water- en slibmodellering in het Mark-Vliet systeem. Breda: Hoogheemraadschap West-Brabant. 30 p.
- Partheniades, E., 1965. Erosion and Deposition of Cohesive Soils, Journal of Hydraulics Division ASCE 91, Proceedings of the American Society of Civil Engineers 4204, pp 105-139.
- Rijn, L.C. van, 1984a, Sediment Transport, Part I: Bed Load Transport, Journal of Hydraulic Engineering, Vol. 110, No. 10: 1431-1456.
- Rijn, L.C. van, 1984b, Sediment Transport, Part II: Suspended Load Transport, Journal of Hydraulic Engineering, Vol. 110, No. 11: 1613-1641.
- Rijn, L.C. van, 1984c, Sediment Transport, Part III: Bed Forms and Alluvial Roughness, Journal of Hydraulic Engineering, Vol. 110, No. 12: 1733-1754.
- Vanoni, V.A., 1975. Sedimentation Engineering, New York: ASCE Task Committee. 745 p.

■ Bijlage 1

**Procesbeschrijvingen slibtransport
in stromende wateren (SLIBSTROOM)**

```

/*
/* SLIBSTROOM: Kwaliteitsmodule voor het berekenen van resuspensie,
/* sedimentatie en transport van zwevende stof in waterlopen.
/*
/* Model = 1 : slibfractie met een continue valsnelheidsverdeling
/* Model = 2 : slibfractie met een constante valsnelheid
/*
/* Verklaring van de gebruikte symbolen voor functies:
/*
/* U = gemiddelde stroomsnelheid (m/s)
/* Uster = schuifspanningssnelheid (m/s)
/* Tau = bodemschuifspanning (Pa)
/* Ws = valsnelheid (m/s)
/* Sed = sedimentatie (m/dag)
/* Res = resuspensie (g/m2.dag)
/*
/* G. Blom en J. Icke, april 1996
water SS1 [13.0] g/m3 :zwevende stofconc.
bottom bodem [265000] g/m2 :slibvoorraad op de bodem
parm Wc [40.0] m/dag :constante valsnelheid
parm Wm [70.0] m/dag :mediane valsnelheid zwevende stof
parm SSo [70.0] g/m3 :beginconc. valsnelheidsproef
parm Tsed [0.30] Pa :kr.bodemschuifspanning sedimentatie
parm Tres [0.60] Pa :kr.bodemschuifspanning resuspensie
parm M [4320] g/m2.dag :resuspensieconstante
parm Rowat [1000.0] kg/m3 :dichtheid water
parm g [9.81] m/s2 :valversnelling
parm dt [0.01042] dag :tijdstap kwaliteitsberekening
parm model [0] - :modelkeuze

xt SSa [5.0] g/m3 :achtergrondconc. zwevende stof
xt Chezy [40.0] m ^ 0.5/s :Chezycoefficient

flow Z [2.00] m :waterdiepte
flow Q [0.50] m3/s :gemiddeld debiet
flow As [100.00] m2 :natte doorsnede

{
U=(Q/As);
Uster=((g^0.5) * abs(U)) / Chezy;
Tau=Dwat * (Uster^2);

if (model == 1)
{
Ws = (8*Wm*(SS1 ^ 3)/(SSo ^ 3));
}

if (model == 2)
{
Ws = Wc;
}

if (WS*dt>Z)
{
Ws = (Z/dt);
}

```

```

if (Tau < Tsed)
{
Sed = Ws*(1-(Tau/Tsed));
Res = 0.0;
}
else if (Tau < Tres)
{
Sed = 0.0;
Res = 0.0;
}

else
{
Sed = 0;
Res = M*((Tau/Tres)-1);
}

if ((Res*dt) > (bodem))
{
Res = bodem/dt;
}

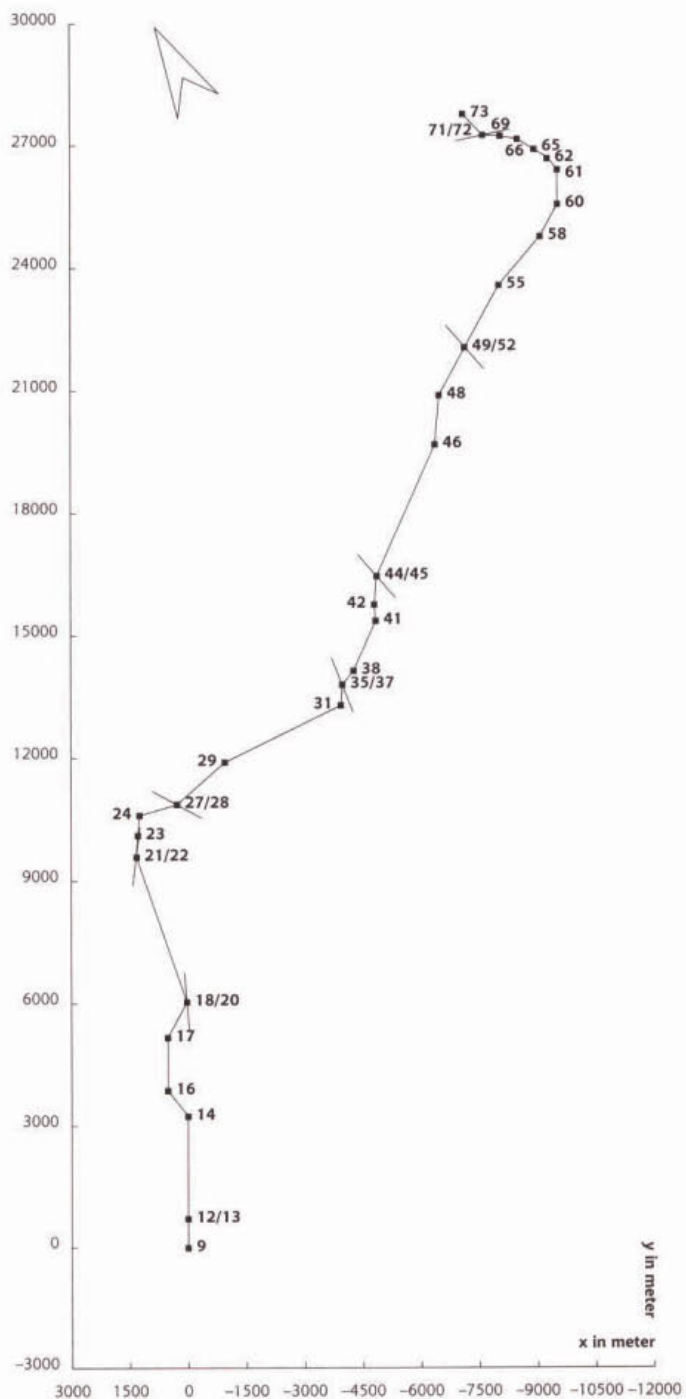
k0(bodem) = (Sed*SS1)-Res;
k0(SS1) = Res/Z;
k1(SS1) = -Sed/Z;

zwevend = SSa+SS1;
}

```

■ Bijlage 2

Het netwerk



PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Slibmeer

een slibtransportmodel voor ondiepe meren

juni 1996

hoofdstuk

5

G.Blom
J.Icke

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

5

Inhoudsopgave

Vooraf

5.1 Slibtransport in ondiepe meren 5

5.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen 5

5.2 Procesbeschrijvingen 6

5.2.1 Theoretische achtergrond 7

5.2.2 Modelbeschrijving 9

5.3 Benodigde invoer 10

5.3.1 Initiële condities 11

5.3.2 Randvoorwaarden 11

5.3.3 Parameters 12

5.3.4 Externe variabelen 13

5.4 Voorbeeld Noordeinderplas 14

5.4.1 Situatieschets 14

5.4.2 DufLOW invoer 15

5.4.3 Resultaten 16

Literatuur 20

Bijlagen

Bijlage 1 Het netwerk 21

Bijlage 2 Procesbeschrijvingen slibtransport in ondiepe meren (SLIBMEER) 22

Bijlage 3 Toelichting bij het programma WINDGOLF 24

Bijlage 4 Gebruikte strijklengten voor model Noordeinderplas 25

Vooraf

Het in deze handleiding beschreven voorbeeld is gebaseerd op een onderzoek naar het slibtransport en lichtklimaat in de Noordeinderplas. Dat onderzoek is uitgevoerd door de Landbouwniversiteit Wageningen, in samenwerking met het Hoogheemraadschap van Rijnland.

5.1 Slibtransport in ondiepe meren

In de veelal ondiepe Nederlandse meren wordt het gedrag en transport van slib en daaraan gebonden verontreinigingen sterk beïnvloed door sedimentatie en resuspensie. Hoewel opwerveling onder invloed van de stroming, opwerveling door bodemwoelende vis of opwerveling door scheepvaart soms ook van belang zijn, is het over het algemeen zo dat de resuspensie van bodemslib in ondiepe meren vooral veroorzaakt wordt door wind-golven. Golven veroorzaken een orbitaalbeweging in de waterkolom, die wrijving (schuifspanning) aan de bodem veroorzaakt. Hierdoor kan bodemmateriaal opwerpen.

In het verleden kwam de aandacht van waterbeheerders voor transport van slib vooral voort uit hun taak watergangen en vaarwegen op de gewenste diepte te houden. In de afgelopen decennia is er ook vanuit het waterkwaliteitsbeheer een sterke belangstelling voor slibtransport ontstaan. Dit hangt vooral samen met het feit dat veel verontreinigingen zich sterk binden aan in het water voorkomende slibdeeltjes. Dit is bijvoorbeeld het geval voor fosfaat, veel zware metalen en organische microverontreinigingen.

Een andere factor die de belangstelling voor het gedrag en transport van slib in ondiepe meren sterk heeft doen toenemen is de invloed van opgewerveld slib op het lichtklimaat in het water. De absorptie en verstrooiing van licht door gesuspendeerd slib kan een grote invloed hebben op het lichtklimaat. In ondiepe meren is de concentratie van gesuspendeerd slib sterk afhankelijk van de resuspensie en sedimentatie.

Bij een beschrijving en analyse van het slibtransport in ondiepe meren is het van groot belang rekening te houden met de verschillen die tussen de slibdeeltjes onderling bestaan. Verschillen in deeltjesgrootte en -samenstelling hebben niet alleen invloed op de valsnelheid en de opwervelbaarheid van materiaal, maar betekenen ook verschillen in de mate waarin verontreinigingen zich binden aan het slib en de invloed op het lichtklimaat. Over het algemeen is het zo dat juist het fijnste slib, het materiaal met de kleinste valsnelheid dat het makkelijkst weer opwerfelt, de grootste concentraties verontreinigingen kent en de grootste invloed op het lichtklimaat heeft.

5.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen

Situaties waarin het kwantificeren van het slibtransport in ondiepe meren van belang kan zijn, zijn onder meer:

- gevallen waarin van elders aangevoerd slib sedimenteert met daaraan gebonden verontreinigingen die in de waterbodem kunnen ophopen;
- gevallen waarin de waterbodem verontreinigd is en waarin nalevering van verontreinigingen vanuit het bodemslib door resuspensie en desorptie van de verontreinigingen belangrijk zou kunnen zijn;
- gevallen waarin de waterbodem van ondiepe meren gesaneerd is, maar door intern transport van slib of sedimentatie van vers aangevoerd materiaal opnieuw contaminatie zou kunnen opleveren;
- situaties waarin het lichtklimaat in belangrijke mate beïnvloed wordt door gesuspendeerd slib en waarin de vraag is in hoeverre resuspensie van bodemslib door windgolven daarbij van belang is.

Maatregelen die het gedrag en transport van slib in ondiepe meren kunnen beïnvloeden en waarvoor een beschrijving van het slibtransport in ondiepe meren gewenst kan zijn, zijn onder meer:

- het uitbaggeren of immobiliseren van resuspendeerbaar slib,
- het aanleggen van dammen om de strijklengten en daarmee de opwerveling van slib te beperken,
- het aanleggen van slibvangen, bijvoorbeeld in de vorm van diepe putten in het meer zelf.

De toepasbaarheid van het model beperkt zich tot ondiepe systemen, waarin resuspensie ten gevolge van wind het belangrijkste mechanisme van opwerveling is. Het effect van stroming op de resuspensie van bodemslib wordt in het model niet beschreven. Ook wordt in het model de invloed van scheepvaart niet in rekening gebracht. Voor systemen, waarin opwerveling door schepen of stroming een belangrijke rol speelt is het model dan ook niet geschikt.

Het onderscheid tussen diepe en ondiepe meren kan worden gemaakt op basis van de verhouding tussen golflengte (L) en diepte (Z):

Diep: $L/Z < 2$
 Medium: $2 < L/Z < 25$
 Ondiep: $25 < L/Z$

De golflengte varieert met de windsnelheid, de diepte en de strijklengte. Tabel 5.1 illustreert het onderscheid tussen diepe en ondiepe meren.

Tabel 5.1 *Onderscheid tussen hydrodynamisch Diepe, Medium en Ondiepe meren bij windkracht 7 (11).*

Strijklengte (m)	Diepte (m)						
	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0	4.0	5.0
100	M (M)	M (M)	D (M)	D (M)	D (M)	D (M)	D (D)
250	M (M)	M (M)	M (M)	D (M)	D (M)	D (M)	D (D)
500	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	D (M)	D (M)	D (M)
1000	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	D (M)	D (M)
2500	M (O)	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	D (M)
5000	M (O)	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	M (M)	D (M)

5.2 Procesbeschrijvingen

Sedimenttransport treedt op onder invloed van de waterbeweging aan de bodem. Tussen water en bodem treedt wrijving op waardoor het sediment in beweging komt. Er zijn globaal drie transportmechanismen te onderscheiden die bed-load, suspended-load en wash-load genoemd worden. Bed-load is het rollen en springen van de zwaardere sedimentdeeltjes over de bodem. Suspended-load betreft slib dat wordt opgewerveld van de bodem en enige tijd in het water verblijft alvorens het bezinkt. Tijdens het verblijf in het water wordt het slib getransporteerd. Wash-load is zwevende stof

dat altijd in het water blijft en nooit sedimenteert.

In ondiepe meren zijn de stroomsnelheden te laag voor bed-load transport. Er is hier alleen sprake van wash-load en suspended-load. De drijvende kracht achter de resuspensie van bodemslib zijn wind-geïnduceerde golven die een schuifspanning aan de bodem veroorzaken.

Voor het opstellen van de massabalans voor zwevende stof is van belang te weten welke horizontale en verticale concentratiegradiënten bestaan. Indien concentratiegradiënten in één dimensie te verwaarlozen zijn, kan de modelbeschrijving eveneens met één dimensie verminderd worden. Vaak wordt aangenomen dat verticale concentratiegradiënten te verwaarlozen zijn. Dit is een geoorloofde aanname indien de verhouding tussen ontmenging door sedimentatie en menging door verticale dispersie voldoende klein is. Als criterium wordt hiervoor de verhouding tussen de karakteristieke tijd voor sedimentatie en dispersie gebruikt (Van Duin, 1992):

$$[1] \quad \frac{t_s}{t_t} = \frac{2 \cdot D_v}{W_s \cdot Z}$$

waarin: t_s karakteristieke tijd voor ontmenging door sedimentatie (s)
 t_t karakteristieke tijd voor menging door dispersie (s)
 W_s valsnelheid ($m \cdot s^{-1}$)
 D_v verticale dispersiecoëfficiënt ($m^2 \cdot s^{-1}$)
 Z diepte (m)

Indien geldt $t_s \gg t_t$, dan is er sprake van een in de verticaal homogeen gemengde waterkolom. In tabel 5.2 wordt een berekening gegeven van de karakteristieke tijden voor menging en ontmenging in een tweetal meren (Lijklema, 1994, Van Duin, 1992, Blom, 1991).

Tabel 5.2 Berekening van de karakteristieke tijd voor sedimentatie en verticale menging.

	Markermeer range	Veluwemeer range
z (m)	2 - 4,5	0,9 - 3,6
W_s (m/s)	$10 \cdot 10^{-6}$ - $100 \cdot 10^{-6}$	$22 \cdot 10^{-6}$ - $270 \cdot 10^{-6}$
D_v (m^2/s)	$2 \cdot 10^{-4}$ - $10 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$ - $10 \cdot 10^{-4}$
t_s / t_t	1 - 100	0,4 - 101

5.2.1 Theoretische achtergrond

Indien concentratiegradiënten in de verticaal verwaarloosd mogen worden luidt de massabalans voor zwevende stof in de waterkolom als volgt (Blom et al, 1992):

$$[2] \quad \frac{\partial Z \cdot SS}{\partial t} + \frac{\partial Z \cdot u \cdot SS}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(Z \cdot D \cdot \frac{\partial SS}{\partial x} \right) - \Phi_{res} + \Phi_{sed} = 0$$

waarin: Z waterdiepte (m)
 SS concentratie zwevende stof ($g \cdot m^{-3}$)
 u stroomsnelheid in de x-richting ($m \cdot s^{-1}$)

- D dispersieconstante in de x-richting ($m^2 \cdot s^{-1}$)
- Φ_{res} resuspensieflux ($g \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$)
- Φ_{sed} sedimentatieflux ($g \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$)

De resuspensie van bodemslib wordt veroorzaakt door de orbitaalsnelheid waarmee water over de bodem heen en weer beweegt. Er bestaan meerdere relaties die het verband tussen de orbitaalsnelheid aan de bodem U_b en resuspensie van bodemslib beschrijven. Deze relaties hebben met elkaar gemeen dat pas resuspensie optreedt indien de orbitaalsnelheid aan de bodem een bepaalde drempelwaarde overschrijdt: de kritische orbitaalsnelheid $U_{b,cr}$.

Als $U_b < U_{b,cr}$ dan geldt: $\Phi_{res} = 0$

Indien $U_b \geq U_{b,cr}$ dan treedt resuspensie op. In de literatuur worden verschillende relaties gegeven, die de resuspensie flux beschrijven. In al deze vergelijkingen wordt de flux gerelateerd aan het snelheidsoverschot aan de bodem. De meest gebruikte relaties worden hier vermeld.

Volgens Lam and Jaquet (1976) geldt:

$$[3] \quad \Phi_{res} = K_1 K_2 \frac{U_b^2 - U_{b,cr}^2}{U_{b,cr}}$$

Migniot (1968) gebruikt de volgende relatie:

$$[4] \quad \Phi_{res} = K_1 \frac{U_b^2 - U_{b,cr}^2}{U_{b,cr}^2}$$

Terwijl Blom et al. (1992), Van Duin (1992) gebruik maken van:

$$[5] \quad \Phi_{res} = K_1 (U_b - U_{b,cr})$$

Golven in ondiepe meren ontstaan onder invloed van de wind. De waterbeweging in golven is ellips- of orbitaal-vormig. De golven planten zich voort in de richting van de bodem en worden gaandeweg uitgedoofd. In ondiepe meren wordt de golfbeweging niet volledig uitgedoofd en er ontstaat op deze manier een heen en weergaande waterbeweging aan de bodem. De orbitaalsnelheid aan de bodem is afhankelijk van de waterdiepte, de golfhogte en de golflengte (Philips, 1966):

$$[6] \quad U_{b,max} = \frac{\pi \cdot H_s}{T_s \cdot \sinh\left(\frac{2\pi z}{L}\right)}$$

- waarin: $U_{b,max}$ orbitaalsnelheid aan de bodem ($m \cdot s^{-1}$)
- H_s significante golfhogte (m)
- T_s significante periode (s)
- L golflengte (m)

De golfkarakteristieken zijn afhankelijk van de strijklengte, de windsnelheid en de

waterdiepte. Voor het voorspellen van de golfkarakteristieken die ontstaan door wind zijn empirische golfvoorspellingsmodellen beschikbaar. Deze modellen zijn oorspronkelijk voor de kust ontwikkeld maar later ook in het Markermeer toegepast. Het golfmodel BOUWS-s blijkt in ondiepe meren het beste te voldoen (CERC, 1984, Bouws et al., 1985, Van Duin, 1992, Icke & Jeurink, 1996).

De sedimentatieflux is afhankelijk van de dichtheid, afmetingen en vorm van de sedimenterende slibdeeltjes. Voor de valsnelheid van een rond deeltje ($< 100\mu\text{m}$) geldt de vergelijking van Stokes:

$$[7] \quad W_s = \frac{1}{18} \cdot \frac{1}{\nu} \cdot \frac{\rho_s - \rho}{\rho} \cdot g \cdot d_s^2$$

waarin:

ν	kinematische viscositeit (m^2/s)
ρ	dichtheid water (kg/m^3)
ρ_s	dichtheid slibdeeltje (kg/m^3)
d_s	diameter slibdeeltje (m)

In hoge concentraties kunnen de deeltjes elkaar hinderen of coaguleren tijdens de sedimentatie. Bovendien is slib in natuurlijke systemen niet homogeen van samenstelling. De resuspensie- en sedimentatiekarakteristieken kunnen daarom niet door een parameterset met 'gemiddelden' worden beschreven. Daarom wordt vaak een indeling gemaakt in afzonderlijke slibfracties. De som van de concentratie van de fracties vormt het zwevende-stofgehalte of de sliblaag op de bodem. De resuspensie/sedimentatieparameters worden voor elke fractie afzonderlijk vastgesteld. De indeling in fracties wordt gemaakt op basis van valsnelheidsklassen, omdat slib met een eenvoudig experiment op basis van valsnelheidsverschillen te scheiden is (Van Duin, 1992).

Het slibtransport in ondiepe meren vertoont vaak kenmerkende ruimtelijke patronen. De sliblaag neemt meestal in dikte toe tegen de overheersende windrichting in. Dit heeft z'n oorzaak in de toename van de strijklengte in de richting van de wind. Die delen van het meer met een hoge strijklengte worden gekenmerkt door netto resuspensie, waardoor de dikte van de sliblaag op de bodem afneemt. In de delen van het meer waar over het algemeen sprake is van lage strijklengten treedt netto sedimentatie op. Daarom vindt men in veel Nederlandse meren een relatief dikke sliblaag in het zuidwestelijk deel en relatief weinig slib in het noordoostelijk deel.

5.2.2 Modelbeschrijving

In het te bespreken model voor de slibhuishouding wordt een onderscheid gemaakt in drie slibfracties. Deze drie slibfracties hebben verschillende fysische eigenschappen die tot uitdrukking komen in verschillende parameterwaarden. De vergelijkingen die voor elke fractie opgelost moeten worden zijn voor alle fracties het zelfde.

In het model SLIBMEER wordt voor de berekening van de resuspensieflux gebruikt gemaakt van de relatie volgens Blom en Van Duin (vergelijking 5). Er treedt resuspensie op als $U_b \geq U_{b,cr}$. Daarnaast wordt de resuspensieflux begrensd door de voorraad slib op de bodem van de betreffende fractie. Als de voorraad op de bodem ontoereikend is voor de potentiële resuspensieflux dan wordt de resuspensie beperkt tot de opwerveling van de aanwezige voorraad op de bodem. De voorraad slib is het produkt van de dichtheid van en de dikte van de sliblaag.

Indien er uitputting van de slibvoorraad optreedt wordt de resuspensieflux gegeven door:

$$[8] \quad \Phi_{res} = \frac{d_b - \rho_b}{dt}$$

waarin: ρ_b dichtheid van de bodem ($\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{cm}$)
 d_b dikte van de sliblaag (cm)
 dt tijdstap (dag)

Ook hier geldt dat de vergelijkingen die voor verschillende fracties moeten worden opgelost dezelfde zijn. Als de slibvoorraad op de bodem geheel is uitgeput is de resuspensieflux gelijk aan nul.

De dikte van de sliblaag wordt berekend als:

$$[9] \quad \frac{d(d_b)}{dt} = \frac{W_s \cdot SS - \Phi_{res}}{\rho_b}$$

De bodem is opgebouwd uit één sliblaag waarin drie slibfracties voorkomen. Deze slibfracties onderscheiden zich in sedimentatie en resuspensiekenmerken. De drie slibfracties zijn allen aan het oppervlak beschikbaar voor resuspensie, tenzij uitputting van de voorraad is opgetreden.

5.3 Benodigde invoer

Tabel 5.3 geeft een overzicht van de benodigde invoer voor het model. Voor het maken van berekeningen met het model zijn de volgende gegevens noodzakelijk:

- gegevens voor de schematisatie, waaronder de morfologie;
- initiële slibgehalten in water en bodem;
- slibconcentraties in binnenstromend water en lozingen;
- windsnelheid en -richting;
- de orbitaalsnelheden op de verschillende knooppunten;
- de dispersiecoëfficiënt;
- parameterwaarden voor resuspensie en sedimentatie

Voor de kalibratie en validatie van het model is het gewenst daarnaast te beschikken over gegevens met betrekking tot:

- gemeten slibconcentraties in de waterkolom;
- gemeten sedimentatiefluxen.

Met DUFLOW kan een quasi tweedimensionaal model voor ondiepe meren gemaakt worden door het meer te schematiseren met behulp van een aantal knopen, die onderling door secties verbonden worden. Het is van belang de knopen en secties zo te kiezen dat de meest voorkomende stromingen beschreven kunnen worden. In ondiepe meren komen vaak circulaire waterstromen voor. Deze kunnen worden

beschreven door zowel in de breedte- als lengterichting meerdere knopen en secties te construeren. Van belang daarbij is dat de som van de oppervlakte van secties, gelijk is aan het totale oppervlak van het meer.

Tabel 5.3 Benodigde invoer model SLIBMEER

Type	Naam	Bron	
Initiële conditie	SS_i	Waterkolom per fractie	Meting/new initial conditions
	$d_{b,i}$	Dikte sliblaag per fractie	Meting/experimenteel
Randvoorwaarden	SS_j	Systeemgrens puntlozingen	Meting/schatting
		Windsnelheid	Meting/KNMI
		Windrichting	Meting/KNMI
Parameters	$W_{s,i}$	Valsnelheid per fractie	Sedimentval/Valsnelheidsproef
	$U_{b,cr}$	Kritische orbitaalsnelheid per fractie	Literatuur/kalibratie
	$K_{res,i}$	Constante resuspensie per fractie	Literatuur/kalibratie
	$\rho_{b,i}$	Dichtheid sediment per fractie	Meting/experimenteel
	dt	Tijdstap	Parameters
Externe variabelen	D	Dispersieconstante	Zie hoofdstuk 1.3.4
	SS_a	Achtergrondconcentratie	Meting
	U_b	Orbitaalsnelheid bodem	WINDGOLF

5.3.1 Initiële condities

Voor het bepalen van de initiële dikte van de sliblaag van de drie afzonderlijke fracties is het noodzakelijk om informatie te hebben over de dikte van de sliblaag op de knooppunten alsmede de fractieverdeling van het slib. Uit het produkt van de totale slibdikte en het percentage waarmee elke fractie voorkomt in het slib volgt de dikte van de sliblaag van de fracties.

De slibdikte kan visueel en experimenteel vastgesteld worden aan de hand van een gestoken bodemkolom. Door te roeren in het water boven het bodemmonster brengt men het slib in suspensie, dat via een hevel verwijderd wordt. De dikte van de sliblaag wordt bepaald door de bodemhoogte voor en na roeren te meten. Met de aldus verkregen suspensie kan men een fractieverdeling op basis van valsnelheidsverschillen uitvoeren. Dit levert informatie op over de dichtheid van de bodem en per fractie de voorraad opwervelbaar slib.

5.3.2 Randvoorwaarden

Op elke plaats waar water in het systeem wordt ingelaten dient tevens een randvoorwaarde voor de concentratie slib in de waterfase van elke fractie gedefinieerd te worden.

De windsnelheid en -richting zijn voor de modelberekeningen van belang in verband met de invloed daarvan op de waterbeweging, maar ook voor de berekening van de optredende orbitaalsnelheden (zie externe variabelen). Met name met het oog op die laatste berekeningen is het van belang dat de frequentie waarmee informatie beschikbaar is aansluit op de kenmerkende tijdschalen voor variatie in resuspensief-luxen en slibgehalten. Veelal wordt een frequentie van enkele malen per uur tot één maal in enkele uren gebruikt. Met het oog op de berekening van de orbitaalsnelheden

(zie 5.3.4) kunnen de windsnelheden en -richtingen het beste als externe file aangeleverd worden.

5.3.3 Parameters

Per fractie zijn parameterwaarden noodzakelijk voor de valsnelheid W_s , resuspensieconstante K_{res} , de kritische orbitaalsnelheid $U_{b,cr}$ en de dichtheid van de sliblaag op de bodem ρ_b .

De sedimentatie eigenschappen kan men afleiden uit de meting van sedimentatiefluxen en het uitvoeren van valsnelheidsexperimenten met het gesedimenteerde materiaal. Met behulp van sedimentvallen waarin sedimentierend materiaal wordt verzameld kan informatie verkregen worden over gemiddelde sedimentatiefluxen. Het verzamelde sediment wordt gescheiden op basis van valsnelheidsverschillen. Dit levert dan informatie op over sedimentatiefluxen van de afzonderlijke fracties.

Voor het scheiden van het sediment wordt gebruik gemaakt van de pipetmethode (Van Duin, 1992, Van de Kerk, 1995). Het sediment wordt in suspensie gebracht in een maatkolf, vervolgens laat men de gesuspenseerde deeltjes bezinken. Op bekende afstand van de bodem van de maatkolf en op bekende tijdstippen wordt dan (voorzichtig) een monster genomen uit de maatkolf. De afstand gedeeld door de tijd is de valsnelheidsgrens van de fractie waarvan de deeltjes zich net niet meer in het monster bevinden. Op basis van het drooggewicht van deze monsters kan men de sedimentatieflux van de onderscheiden fracties berekenen.

De resuspensiekaracteristieken kunnen afgeleid worden uit zwevende stofgehalten in combinatie met modelkalibratie. Daartoe dient het zwevende stofgehalte met een zekere regelmaat van eens per dag/eens per uur gemeten te worden. Voor de valsnelheid wordt dan het gemiddelde van de valsnelheidsgrenzen uit de fractieverdeling gebruikt. Als uitgangswaarden voor kalibratie van de resuspensieparameters kunnen literatuurwaarden uit een vergelijkbaar meer worden gebruikt. Door de parameters systematisch te variëren kan vastgesteld worden of de gesimuleerde en gemeten zwevende stofgehalten overeen komen, evenals de sedimentatiefluxen van de afzonderlijke fracties. De kalibratie wordt dus handmatig volbracht. Binnen DUFLOW is geen kalibratieroutine beschikbaar.

De modelparameters voor Nieuwkoop zijn geschat met behulp van een slibmodel waarin transporttermen en dispersie buiten beschouwing zijn gelaten. Op een tweetal locaties in het meer zijn gegevens over zwevende stofgehalte en sedimentatieflux beschikbaar. Voor de valsnelheden van de fracties zijn dezelfde waarden gebruikt als bij de fractieverdelingsexperimenten op basis van valsnelheidsverschillen. De dichtheid en de fractieverdeling van de bodem zijn experimenteel vastgesteld. De aldus verkregen parameters bleken redelijk te voldoen.

De dichtheid van de bodem volgt uit de experimenten met een gestoken bodemkolom. Hiertoe wordt de volledige sliblaag in suspensie gebracht en met een hevel verwijderd. Uit het drooggewicht en de hoogte van de bodemkolom voor en na het roeren volgt de dichtheid van de totale sliblaag. Voor het model voor Nieuwkoop is de aanname gemaakt dat de dichtheid van alle drie de fracties hetzelfde is.

In de praktijk worden uiteenlopende parametersets gevonden voor diverse groepen van Nederlandse ondiepe meren. Tabel 5.4 geeft waarden voor enkele grote en kleinere Nederlandse meren.

De parameter d_t , die als parameter moet worden ingevoerd, dient gelijk te zijn aan de gebruikte tijdstap voor de kwaliteitsberekening. Deze wordt opgegeven bij de parameters. De maximaal toelaatbare waarde is mede afhankelijk van de maximale valsnelheid en de minimale diepte. Het produkt van maximale valsnelheid en de tijdstap mag niet groter zijn dan de kleinst gebruikte diepte in het netwerk.

5.3.4 Externe variabelen

De orbitaalsnelheden worden als externe variabelen (in ruimte en tijd variërend) voor elke knoop in het model opgelegd. Voor het berekenen van de orbitaalsnelheden is het model WINDGOLF ontwikkeld en bijgeleverd. Dit model berekent de orbitaalsnelheden op elk knooppunt op basis van:

- een door de gebruiker aan te leveren file met windsnelheden en -richtingen (ook te gebruiken om deze gegevens aan het waterbewegingsmodel op te leggen),
- een door de gebruiker aan te leveren file met, voor elk knooppunt, de strijklengten voor 8 windrichtingen.

Tabel 5.4 Resuspensie-/sedimentatieparameters voor ondiepe meren

Locatie/bron/jaar	Fractie	W_s (m.d ⁻¹)	K_{res} (g.m ⁻³ .d ⁻¹)	$U_{b,cr}$ (m.s ⁻¹)
Breukeleveen Lüring et al 1995	1	0.17	24.2	0.0
	2	1.3	50.1	0.0
	3	2.1	57.8	0.0
	4	5.6	104.2	0.0
	5	8.6	211.7	0.0
Ketelmeer Blom & Toet 1991	1	1.7	0.63	$2.6 \cdot 10^{-8}$
	2	8.6	2.8	$1.3 \cdot 10^{-3}$
	3	36.3	11.2	$5.0 \cdot 10^{-2}$
Veluwemeer Blom et al 1992	1	1.7	812.2	0.0
	2	7.2	622.1	$7.1 \cdot 10^{-4}$
	3	23.3	449.3	$4.8 \cdot 10^{-3}$
	1-3	1.5	769.0	$1.0 \cdot 10^{-4}$
Ankeveense Plassen Windemuller 1994	1	3.5	1486	$4.0 \cdot 10^{-5}$
	2	70.0	4648	$4.0 \cdot 10^{-5}$
Ijsselmeer Ubbels 1994	1	0.95	2.16	$4.2 \cdot 10^{-4}$
	2	3.5	3.0	$4.2 \cdot 10^{-3}$
	3	4.8	3.2	$8.6 \cdot 10^{-3}$
	4	13.8	25.9	$2.0 \cdot 10^{-3}$
	5	26.9	432.0	$4.0 \cdot 10^{-2}$
Markermeer van Duin 1992	1	0.26	0.05	$8.0 \cdot 10^{-5}$
	2	1.9	0.7-1.0	$6.0 \cdot 10^{-3}$
	3	8.1	0.9-3.6	$2.6 \cdot 10^{-2}$
	4	31.6	7.4-9.0	0.1
Nieuwkoop Icke & Jeurink 1996	1	1.0	43.2	$1.0 \cdot 10^{-5}$
	2	5.0	112.3	$1.0 \cdot 10^{-4}$
	3	40.0	1728	$1.0 \cdot 10^{-3}$

Het beste kunnen ter plaatse gemeten windsnelheden en -richtingen gebruikt worden. Daarbij is het van belang dat in het model uitgegaan wordt van gemeten windsnelheden op 10 meter boven het wateroppervlak. Eventueel kunnen lager of hoger gemeten windsnelheden teruggerekend worden naar die op 10 meter hoogte met behulp van:

$$[10] \quad W_{10} = W_H \cdot \left(\frac{10}{H}\right)^{\frac{1}{7}}$$

waarin: W_{10} windsnelheid op 10 meter hoogte ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)
 W_H windsnelheid op H meter hoogte ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)
H hoogte waarop de windsnelheid is gemeten (m)

De strijklengten voor elk knooppunt kunnen door de gebruiker van aanwezig kaartmateriaal afgelezen worden. De strijklengte is de afstand tussen oever en knooppunt, dus de afstand waarover de wind invloed op het wateroppervlak heeft. Om praktische redenen wordt de windroos verdeeld in 8 gelijke delen ("sectoren" van elk 45 graden). De strijklengte voor elke sector is de gemiddelde voor de binnen die sector voorkomende windrichtingen.

In bijlage 3 wordt het model WINDGOLF en de daarvoor noodzakelijke invoer beschreven. In bijlage 4 is een overzicht van de voor de Noordeinderplas gebruikt strijklengten opgenomen.

De dispersiecoëfficiënt is een maat voor de afvlakking van concentratiegradienten ten gevolge van turbulentie en stroomsnelheidsverschillen. De dispersiecoëfficiënt is een ijkparameter. Een te lage dispersiecoëfficiënt kan de oorzaak zijn van instabiliteit ten gevolge van te hoge concentratiegradienten.

5.4 Voorbeeld Noordeinderplas

5.4.1 Situatieschets

Er is een model uitgewerkt voor de Noordeinderplas te Nieuwkoop. De plas ligt in een veengebied en is ontstaan na veenwinning. De plas is gemiddeld ca. 2,5 m diep, wat relatief diep is voor een veenplas. Op de bodem van de plas bevindt zich een sliblaag met een gemiddelde dikte van ca 5,5 cm. Tijdens stormachtige periodes kunnen hoge concentraties zwevende stof voorkomen door opwerveling van dit bodemslib. Dit heeft onder andere negatieve gevolgen voor het lichtklimaat. Er is een model uitgewerkt om de concentratie zwevende stof in het water te simuleren tijdens een periode met hoge windsnelheden.

5.4.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

De waterstroming in het meer wordt geschematiseerd door een gesloten netwerk van kanalen (zie bijlage 1). Het systeem staat niet in verbinding met de omgeving, er is geen aan- of afvoer van water.

knopen

De knopen zijn regelmatig over het meer verspreid. Zij zijn op een redelijke afstand van de oever gelegd om de vereiste minimale diepte te kunnen respecteren. In de lengterichting is een grotere afstand tussen de knopen genomen. Dit is om twee redenen gedaan:

- dit komt overeen met de natuurlijke vorm en ligging van het meer;
- de grootste gradiënten in diepte treden op in de breedterichting van het meer.

Er wordt in het model geen rekening gehouden met de afvoer van neerslag.

secties

De knopen zijn zodanig verbonden door secties dat een rechthoekig patroon is gecreëerd. De secties zijn evenwijdig aan de noordwestelijke oever aangelegd. Op deze wijze kunnen stromingen en slibhuishouding in de lengterichting van het meer geobserveerd worden. Te verwachten valt dat de optredende waterstroming en het slibtransport noordoost-zuidwest georiënteerd is. De lengte van de secties bedraagt 550 of 160 meter.

De Chézycoëfficiënt is $40 \text{ m}^{1/2}/\text{s}$; de bodem van het meer is vrij van begroeiing zodat de wrijvingsweerstand voor stroming laag is.

dwarsdoorsneden

De secties hebben een rechthoekig dwarsprofiel. De breedte van de secties is gelijk aan de oppervlakte van het meer gedeeld door de totale lengte van alle secties. Elke sectie heeft een breedte van 131 meter.

kunstwerken

Er zijn geen kunstwerken opgenomen.

INITIËLE CONDITIES

De waterpeilen en debieten zijn berekend op de dag voorafgaand aan de simulatieperiode. De initiële waterpeilen en debieten zijn hieruit afgeleid met het programmaonderdeel new initial conditions.

De initiële concentratie in het water is 0 mg/l voor elke slibfractie. De voorraad slib is voor elke fractie in elke knoop afzonderlijk bepaald. De fractieverdeling van het slib is voor elke locatie in het meer constant verondersteld, zodat de verhouding tussen de drie slibfracties overal gelijk is, alleen de dikte van de sliblagen varieert.

RANDVOORWAARDEN

Aan het stromingsmodel zijn randvoorwaarden opgelegd voor windrichting en windsnelheid. Deze zijn voor elk uur gemeten op een locatie in het noordoosten van Noordeinderplas.

Er zijn geen kwaliteitsrandvoorwaarden in het model gedefinieerd.

EXTERNE VARIABELEN

De maximale orbitaalsnelheid aan de bodem is voor elk knooppunt ingevoerd als een non-equidistant time serie. De orbitaalsnelheden worden zijn met behulp van het programma WINDGOLF berekend en opgevraagd in DUFLOW als importfile.

In het model is de achtergrondconcentratie zwevende stof vastgelegd op 10 mg/l , waarvan 8 mg/l algen.

PARAMETERS

Parameters zijn gedefinieerd voor de valsnelheid, de resuspensieconstante, de kritische orbitaalsnelheid, de dichtheid van slib op de bodem en de tijdstap voor de kwaliteitsberekeningen.

CALCULATION SETTINGS

De duur van de simulatie periode is een week. De tijdstap voor stromingsmodel en de kwaliteitsberekening is 10 minuten.

Bij de stromingsberekening wordt gebruik gemaakt van de optie neglected Froude en een theta van 0.7. Dit is proefondervindelijk vastgesteld. Het meenemen van de Froude-term leidt tot instabiliteit. Bij de kwaliteitsberekening wordt gebruik gemaakt van een theta van 0.55.

Tabel 5.5 gebruikte parameters voor de simulatie van windgeïnduceerde resuspensie in de Noordeinderplas, Nieuwkoop.

	W_s (m/d)	K_{res} (g·sec/m ³ ·d)	$U_{b,cr}$ (m/s)	ρ_b (g/m ² ,cm)
fractie 1	1.00	43.2	$1 \cdot 10^{-5}$	1000
fractie 2	5.00	112.3	$1 \cdot 10^{-4}$	1000
fractie 3	40.0	1728	$1 \cdot 10^{-3}$	1000

5.4.3 Resultaten

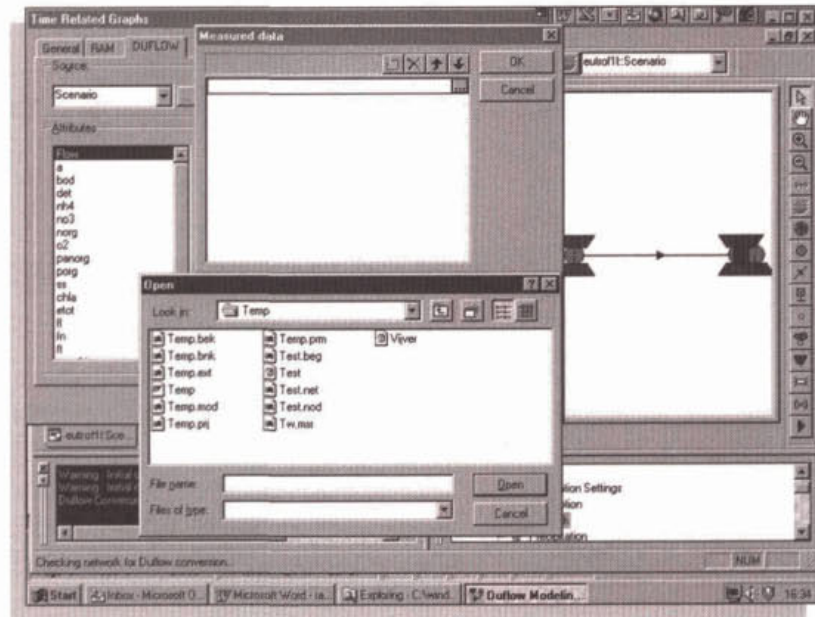
Er is een simulatie uitgevoerd voor de periode van 25-11-95 t/m 01-11-95. Tijdens deze episode is een maximale windsnelheid van 13 m/s bereikt, de windrichting was zuidwest krimpand naar noordwest.

Uit figuren 5.2 en 5.3 blijkt de overeenkomst tussen de windsnelheid en de zwevende-stofconcentratie. De hogere windsnelheid heeft een hogere orbitaalsnelheid aan de bodem tot gevolg, wat leidt tot een hogere concentratie zwevende stof in het water. Uit figuur 5.1 blijkt dat de gesimuleerde zwevende stofconcentratie de gemeten zwevende stofconcentratie aardig benadert. Het is mogelijk de rekenresultaten te vergelijken met meetresultaten. Hiertoe moeten de gemeten waarden ('measured data') op dezelfde manier opgeslagen zijn als de randvoorwaarden. Meer informatie hierover staat in de Reference Manual in het hoofdstuk 'File Formats'. Om zowel berekende als gemeten waarden in één grafiek te presenteren dienen de volgende acties uitgevoerd te worden.

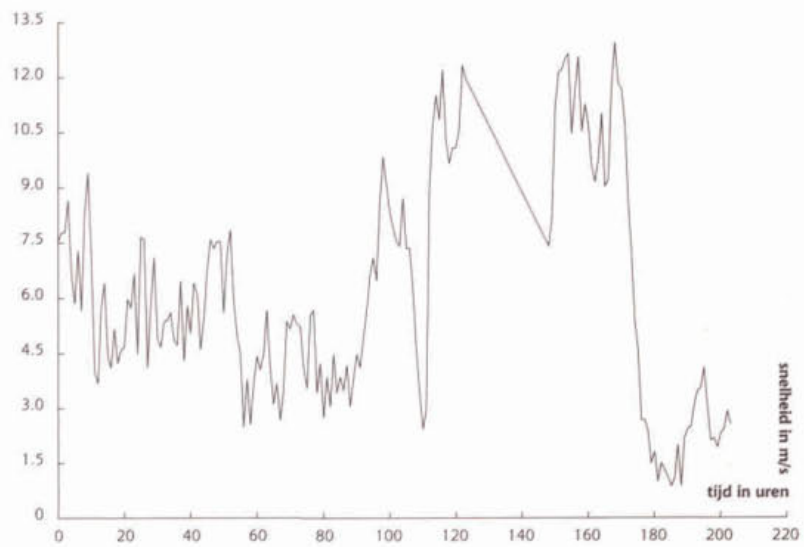
- Open het New Time Graph venster
- Kies DufLOW tab
- Klik op <...> bij Source; de Measured Data dialoog wordt geopend
- Klik op de icoon die een kader met een ster bevat; er wordt nu een nieuwe regel toegevoegd
- Klik op <...> aan het eind van de regel; de Open File dialoog verschijnt.

In figuur 5.1 zijn de vensters en dialogen weergegeven, waarmee meetresultaten ingelezen kunnen worden.

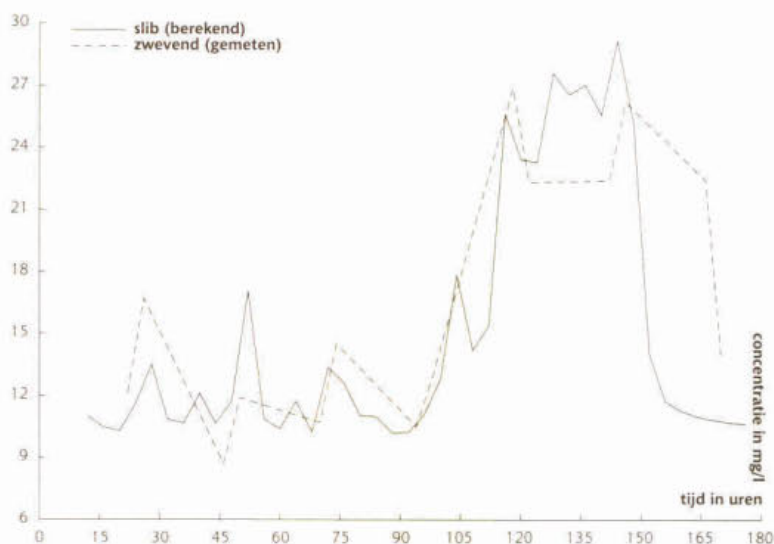
Figuur 5.1 Vergelijken van simulatieresultaten met meetgegevens



Figuur 5.2 Windsnelheidsverloop (m/s) boven de Noordeinderplas in de periode van 25-10-95 t/m 01-11-95

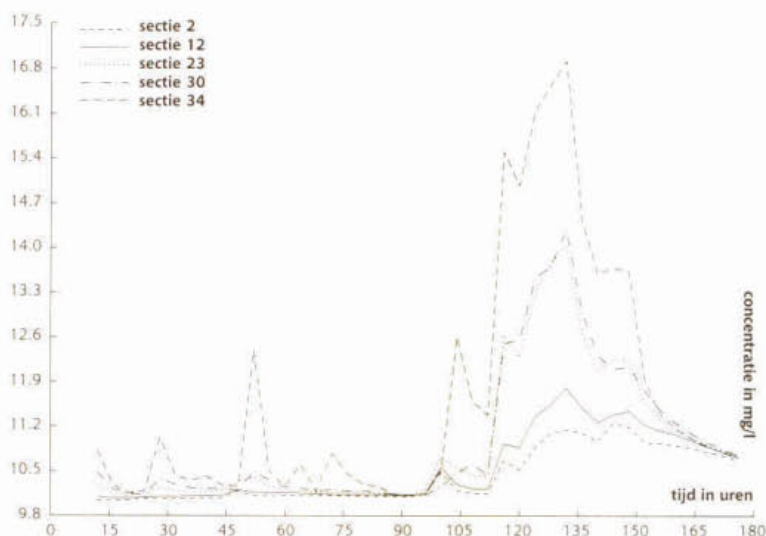


Figuur 5.3 Gemeten en berekende concentraties zwevende stof (mg/l) in de Noordeinderplas in de periode 25-10-95 t/m 01-11-95

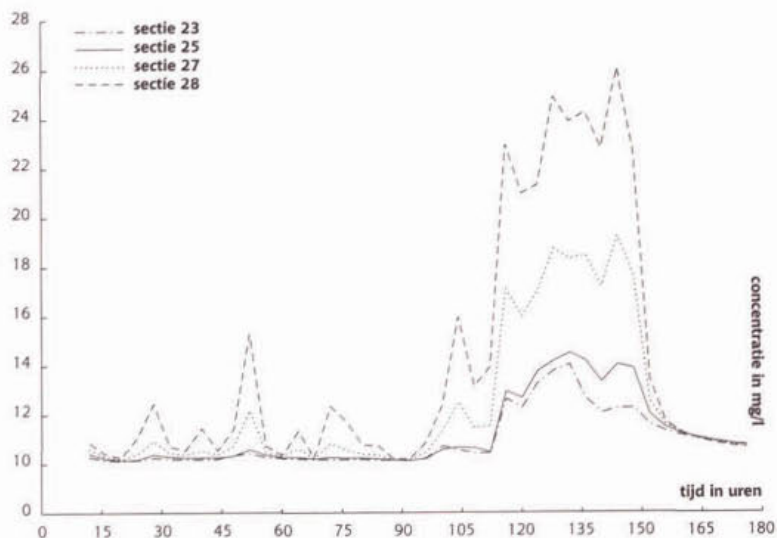


Uit figuren 5.4 en 5.5 wordt het effect van een hogere strijklengte duidelijk. In de simulatieperiode was de windrichting zuidwest krimpnd naar noordwest, met als gevolg dat de strijklengte het hoogste is in de (noord)oostelijke uithoeken van het meer. De concentraties zwevende stof blijken in dezelfde richting toe te nemen. Dit is te verklaren uit de hogere strijklengten in de noordoostelijke uithoeken van het meer. Deze hebben een grotere golfhoogte tot gevolg op deze plaatsen, waardoor de orbitaalsnelheid aan de bodem en daarmee de resuspensie van slib eveneens hoger zijn.

Figuur 5.4 Concentratie zwevende stof (mg/l) op diverse locaties in de Noordeinderplas in de richting ZZW-NNO

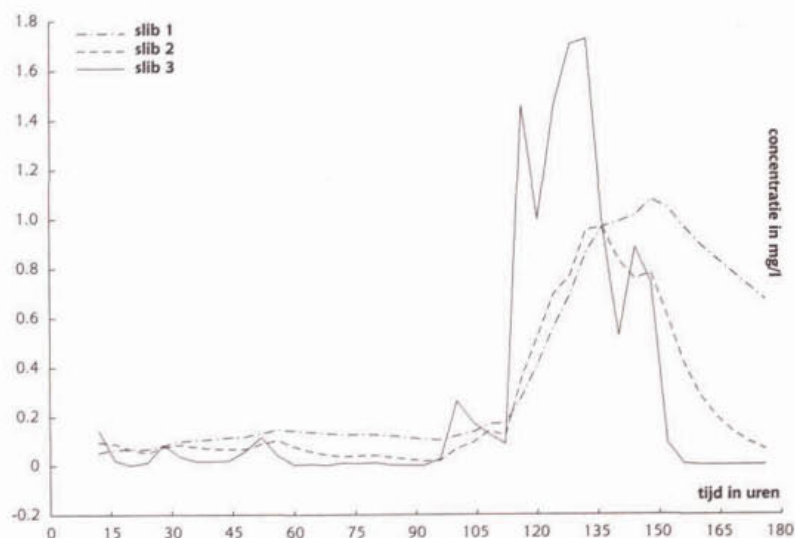


Figuur 5.5 Zwevende-stofconcentraties (mg/l) op diverse locaties in de Noordeinderplas, in de richting NNW-ZZO



In figuur 5.6 zijn de concentraties van de drie fracties gesuspendeerd slib afgebeeld. Fractie 1 is de lichtste fractie, fractie 3 de zwaarste fractie. Fractie 3 heeft een hoge dynamiek: in korte tijd worden relatief hoge concentraties bereikt, die vervolgens snel weer afnemen. Fractie 1 daarentegen accumuleert in het water en begint pas te dalen als fractie 3 al lang weer uit het water is verdwenen. De lage valsnelheid is hiervan de oorzaak. Bij gegeven valsnelheden en een gemiddelde waterdiepte van 2 m, duurt het 2 dagen voor fractie 1 volledig uit het water is verdwenen. Vergelijken we dit met fractie 3, dan is deze fractie binnen 1:15 uur geheel gesedimenteerd. Fractie 3 bereikt hogere piekconcentraties door de hogere resuspensieconstante.

Figuur 5.6 Fractieverdeling van gesuspendeerd slib (mg/l). Noordeinderplas

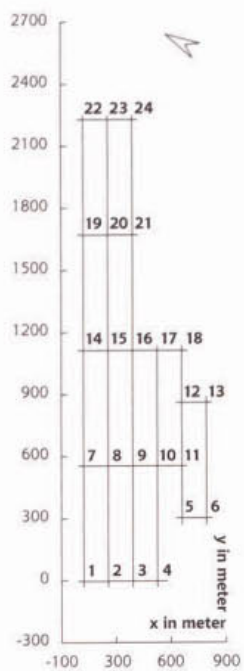


Literatuur

- Blom, G., 1991, Slib, slibtransport en lichtklimaat in de randmeren, Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Natuurbeheer, sectie Waterkwaliteitsbeheer, rapportnr. 91-15.
- Blom, G., C. Toet, 1991, A sedimenttransport model for lake Ketel (Netherlands): a tool for water management, in *Wat.Sci.Tech.* Vol24, No6, pp 141-148
- Blom, G., E.H.S. van Duin, R.H. Aalderink, L. Lijklema, C. Toet, 1992, Modelling sediment transport in shallow lakes - interactions between sediment transport and sediment composition, *Hydrobiologia*, 235/236: 153-166
- Bouws, E., J.J. Ephrauns, J.A. Ewing, P.E. Francis, H. Gunther, P.A.E.M. Janssen, G.J. Komen, W. Roosenthal, W.J.P. de Voogt, 1985, A shallow water intercomparison of three numerical wave prediction models (SWIM), *Quart. J.R. Met. Soc.* 111: pp 1087-1112.
- CERC, 1984, Shore protection manual, volume I and II, Coastal Engineering Research Centre, Department of the Army, US Government Printing Office, Washington D.C.
- Duin, E.H.S. van, 1992, Sedimenttransport, light and algal growth in the Markermeer, Wageningen
- Icke, J. en M.H.B. Jeurink, 1996, Modelleren van slibhuishouding en lichtklimaat in de Nieuwkoopse Plassen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie, doctoraalverslag (in voorbereiding).
- Kerk, I.F. van de, 1995, Resuspensie, sedimentatie en lichtklimaat in de Nieuwkoopse Plassen, Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie, doctoraalverslagnr. 020/95.
- Lam, D.C.L., J.M. Jaquet, 1976, Computations of physical transport and regeneration of phosphorus in lake Erie, Fall 1970, *J. Fish. Res. Board Can.* 33: pp 550-563.
- Lijklema, L. en A.A. Koelmans, 1994, Systeemanalyse in waterkwaliteitsbeheer I, Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en aquatische Oecologie, collegedictaat.
- Lüring, M., 1993, Resuspensie, sedimentatie en lichtklimaat in de Breukeleveense Plas. De bijdrage van wind, vis en visbroed aan de uitdoving van licht, Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Natuurbeheer, Sectie Waterkwaliteitsbeheer, doctoraalverslag nr. 3061.
- Lüring, M., G. Blom, E. van Donk, 1995, Resuspensie, sedimentatie en lichtklimaat in de Breukeleveense Plas, in *H2O* (28), 7/95, p194-p198.
- Spaans, W., N. Booy, N. Praagman, R. Noorman en J. Lander, 1989, DUFLOW, a microcomputer-package for the simulation of one-dimensional unsteady flow in open channel systems, Delft.
- Ubbels, A., 1994, Calibratie van STRESS-2d, Test golfvoorspellingsmodellen & schatting resuspensie/sedimentatie parameters, Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie, doctoraalverslag nr. 027/94.
- Windemuller, P., 1994, Modelleren van resuspensie en lichtklimaat in de Hollands Ankeveense Plassen, Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie, doctoraalverslag nr. 042/94.

■ Bijlage 1

Het netwerk



■ Bijlage 2

Procesbeschrijvingen slibtransport in ondiepe meren (SLIBMEER)

```

/* */
/* Massabalans voor 3 slibfracties in de waterfase en in de bodem. */
/* Geschreven voor de Noordeinderplas te Nieuwkoop */
/* */
/* Toelichting gebruikte functies: */
/* resflux      g/m2dag      : resuspensieflux */
/* zwevend      g/m3         : conc zwevende stof */
/* sliblaag      cm          : dikte sliblaag op de bodem */
/* */
/* G. Blom & J. Icke, april 1996 */
/* */

```

```

water  slib1  [0.00]  g/m3      ;conc fractie 1 in water
water  slib2  [0.00]  g/m3      ;conc fractie 2 in water
water  slib3  [0.00]  g/m3      ;conc fractie 3 in water

```

```

bottom dikte1 [0.65]  cm      ;slibdikte fractie 1
bottom dikte2 [0.75]  cm      ;slibdikte fractie 2
bottom dikte3 [4.10]  cm      ;slibdikte fractie 3

```

```

parm  Ws1    [1.00]  m/dag    ;valsnelheid fractie 1
parm  Ubc1   [0.00001] m/sec    ;kr orbitaalsnelheid fractie 1
parm  Kres1  [43.20] gs/m3d    ;resuspensie const fractie 1
parm  ro1    [1000]  g/m2cm    ;dichtheid fractie 1 in bodem
parm  Ws2    [5.00]  m/dag    ;valsnelheid fractie 1
parm  Ubc2   [0.0001] m/sec    ;kr orbitaalsnelheid fractie 2
parm  Kres2  [112.3] gs/m3d    ;resuspensie const fractie 2
parm  ro2    [1000]  g/m2.cm   ;dichtheid fractie 2 in bodem
parm  Ws3    [40.0]  m/dag    ;valsnelheid fractie 3
parm  Ubc3   [0.001] m/sec    ;kr orbitaalsnelheid fractie 3
parm  Kres3  [1728]  gs/m3d    ;resuspensie const fractie 3
parm  ro3    [1000]  g/m2.cm   ;dichtheid fractie 3 in bodem
parm  dt     [0.01042] dag     ;tijdstep kwaliteitsberekening

```

```

xt  achter [10.0]  gr/m3    ;achtergrondconc zwevende stof
xt  Ub     [0.100] m/sec    ;orbitaalsnelheid aan de bodem

```

```

flow  Z     [1.000]  m        ;diepte

```

```

{
if (Ub>Ubc1 && (ro1*dikte1) >= (dt*Kres1*(Ub-Ubc1)))
{
resflux1 = Kres1*(Ub-Ubc1);
}
else if (Ub>Ubc1 && (ro1*dikte1) < (dt*Kres1*(Ub-Ubc1)))
{
resflux1 = (ro1*dikte1)/dt;
}
else
{
resflux1 = 0;
}
}

```

```

k0(slib1) = resflux1/Z;

```



```

k1(slib1)=-Ws1/Z;
k0(dikte1)=((Ws1*slib1)-resflux1)/ro1;

if (Ub>Ubc2 && (ro2*dikte2) >= (dt*Kres2*(Ub-Ubc2)))
{
  resflux2 = Kres2*(Ub-Ubc2);
}
else if (Ub>Ubc2 && (ro2*dikte2) < (dt*Kres2*(Ub-Ubc2)))
{
  resflux2 = (ro2*dikte2)/dt;
}
else
{
  resflux2=0;
}

k0(slib2)=resflux2/Z;
k1(slib2)=-Ws2/Z;
k0(dikte2)=((Ws2*slib2)-resflux2)/ro2;

if (Ub>Ubc3 && (ro3*dikte3) >= (dt*Kres3*(Ub-Ubc3)))
{
  resflux3 = Kres3*(Ub-Ubc3);
}
else if (Ub>Ubc3 && (ro3*dikte3) < (dt*Kres3*(Ub-Ubc3)))
{
  resflux3 = (ro3*dikte3)/dt;
}
else
{
  resflux3=0;
}

k0(slib3)=resflux3/Z;
k1(slib3)=-Ws3/Z;
k0(dikte3)=((Ws3*slib3)-resflux3)/ro3;

zwevend = achter + slib1 + slib2 + slib3;
sliblaag = dikte1 + dikte2 + dikte3;

}

```

Toelichting bij het programma windgolf

DOEL VAN HET PROGRAMMA

WINDGOLF berekent de maximale orbitaalsnelheid aan de bodem ten gevolge van golven die ontstaan onder invloed van de wind. Voor het voorspellen van de golfhoogte, golfperiode en golf lengte wordt gebruik gemaakt van het golfvoorspellingsmodel BOUWS.

De golfkarakteristieken zijn afhankelijk van :

- de strijklengte, dit is de afstand van de locatie in het meer tot de oever tegen de richting van de wind in;
- de windsnelheid;
- de waterdiepte.

Met de voorspelde golfkarakteristieken wordt de orbitaalsnelheid aan de bodem berekend.

WERKWIJZE

Tijdens het runnen van WINDGOLF wordt gevraagd om twee invoerfiles:

- een file met windgegevens : windrichting en windsnelheid;
- een file met strijklengte en diepte gegevens van de locaties waarvoor de orbitaalsnelheid moet worden berekend. Er wordt gerekend met de strijklengtes voor 8 verschillende windklassen.

Deze files dienen in dezelfde directory te staan als het programma. Dit is automatisch de werkdirectory voor WINDGOLF. Vervolgens wordt voor elke locatie afzonderlijk een file met orbitaalsnelheden aangemaakt met de naam: UBMAX<locatienummer>.RES.

De resultatenfiles komen in de zelfde directory als programma en invoerfiles.

INVOERFILE MET WINDGEGEVENS

<yymmdd> <hhmm> <windsnelheid> <windrichting>

voorbeeld: 960401 0000 7.0 180.0
 960401 0100 8.5 190.0
 960401 0200 9.2 185.0

INVOERFILE MET STRIJKLENGTEGEGEVENS

<commentaarregeltje>

<locatienummer> <diepte> <N> <NO> <O> <ZO> <Z> <ZW> <W> <NW>

voorbeeld: knoop diepte N NO O ZO Z ZW W NW
 1 1.50 10 12 14 16 16 15 12 10
 2 2.25 22 17 13 11 5 5 0 3

UITVOERFILE MET ORBITAALGEGEVENS

<yymmdd> <hhmm> <orbitaalsnelheid>

voorbeeld: 960401 0000 0.1002
 960401 0100 0.1251
 960401 0200 0.1427

De uitvoerfiles kunnen in DUFLOW opgevraagd worden als externe waterkwaliteitsvariabelen.

■ Bijlage 4

**Gebruikte strijklengten voor
model Noordeinderplas**

knoop	diepte	N	NO	O	ZO	Z	ZW	W	NW
1	1.31	148	490	1219	570	364	171	125	91
2	1.72	342	969	1083	330	205	159	159	262
3	0.99	467	1254	182	193	114	171	171	307
4	0.40	627	1561	820	0	0	0	0	444
5	0.46	763	1983	535	342	399	0	91	661
6	1.47	912	1995	364	250	285	273	125	832
7	2.36	159	399	1026	798	1026	684	342	159
8	2.91	319	855	718	684	912	615	547	319
9	2.99	444	1140	592	558	684	501	672	456
10	2.89	604	1482	524	421	627	364	729	604
11	2.48	741	1710	399	307	421	535	729	718
12	1.80	741	1482	228	216	307	798	1003	741
13	0.45	900	1402	114	68	136	729	1014	877
14	1.89	136	364	798	467	969	1128	307	136
15	2.59	285	706	604	399	752	1003	684	296
16	1.99	433	1083	421	296	547	855	946	433
17	0.93	592	1048	159	182	387	1060	1117	570
18	0.40	741	1197	68	34	136	1048	1254	729
19	2.49	102	228	604	399	513	1459	285	114
20	3.40	250	399	547	307	376	182	592	262
21	2.09	399	684	171	159	182	1596	912	421
22	1.58	57	114	148	193	399	1846	171	91
23	1.25	228	159	114	148	285	2143	490	205
24	1.20	250	34	22	68	148	228	912	376

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Het lichtklimaat onder water

augustus 1997

hoofdstuk

6

G. Blom
J. Icke

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

6

Inhoudsopgave

6.1 Het lichtklimaat onder water 5

6.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5

6.2 Procesbeschrijvingen 5

6.2.1 Aansluiting op een slibmodel voor ondiepe meren 7

6.2.2 Aansluiting op een eutrofiëringsmodel 7

6.3 Benodigde invoer 8

6.3.1 Parameters 8

6.3.2 Externe variabelen 9

6.4 Voorbeeld Noordeinderplas, Nieuwkoop 9

6.4.1 Situatieschets 9

6.4.2 DufLOW invoer 10

6.4.3 Resultaten 11

Literatuur 12

Bijlagen

Bijlage 1 Procesbeschrijvingen lichtklimaat (SLIBM_L.MOD) 13

Bijlage 2 Procesbeschrijvingen lichtklimaat (EUTROF1L.MOD) 15

Bijlage 3 Procesbeschrijvingen lichtklimaat (EUTROF2L.MOD) 16

6.1 Het lichtklimaat onder water

Het onderwater-lichtklimaat is een bepalende factor voor de ontwikkeling van aquatische ecosystemen. De groei van algen en waterplanten wordt in sterke mate bepaald door de beschikbare hoeveelheid licht onder water. Ook voor de recreatieve functie van water is licht van groot belang. Met name geldt dit voor de zichtdiepte. Vanwege de ecologische en recreatieve betekenis zijn in de normen voor de waterkwaliteit ook minima voor de gewenste zichtdiepte vastgelegd. In de algemene milieukwaliteitsdoelstellingen is een zichtdiepte van 40 cm opgenomen. Voor wateren met de functie zwemwater is de doelstelling voor de zichtdiepte 1 meter.

In de afgelopen decennia is het lichtklimaat onder water uitgebreid onderzocht. Dat heeft geleid tot het inzicht dat de zichtdiepte en de uitdoving van licht onder water sterk bepaald worden door de concentratie van groepen optisch actieve stoffen die wisselend aangeduid worden als humuszuren, gelbstoff of yellow substance. Bovendien is aangetoond dat het lichtklimaat zich veelal met betrekkelijk eenvoudige lineaire relaties tussen de zichtdiepte of extinctie (een maat voor de uitdoving van licht) enerzijds en de concentratie van de optisch actieve stoffen anderzijds, laat beschrijven.

6.1.1 Toepassingsmogelijkheden

Toepassingsmogelijkheden zijn vooral van belang voor het beheer van stagnante wateren. Inzicht in de relatieve bijdrage van verschillende stofgroepen aan de uitdoving van licht is van groot belang voor de interpretatie van modeluitkomsten en het maken van keuzen in het beheer.

Zo waren in veel Nederlandse meren (en zijn soms nog) algen de factor die het lichtklimaat bepalen. Door de terugdringing van de fosfaatbelasting is de algengroei in veel situaties belangrijk teruggedrongen en blijken nu andere componenten een relatief belangrijke bijdrage aan de uitdoving van licht te hebben. Onder deze componenten is bijvoorbeeld de opwerveling van bodemslib met name voor ondiepe meren een belangrijke factor.

6.2 Procesbeschrijvingen

De bijdrage van optisch actieve componenten aan de mate van adsorptie en verstrooiing is lineair gerelateerd aan de concentratie van deze componenten. Voor het waterbeheer zijn de gecombineerde effecten van adsorptie en verstrooiing het meest van belang. De totale uitdoving van licht in het voor planten en algen belangrijke golflengtegebied (400-700 nm) wordt uitgedrukt in de extinctiecoëfficiënt: K_d (m^{-1}). De zichtdiepte wordt gemeten en uitgedrukt als Secchi-diepte: S_d (m). De volgende lichtabsorberende en -verstrooiende componenten zijn van invloed op het lichtklimaat:

- de concentratie chlorofyl-a;
- de concentratie organische zwevende stof (detritus);
- de concentratie minerale zwevende stof;
- de aanwezigheid van gelbstoff (absorptie van licht bij 380 nm).

Ondanks het feit dat op theoretische gronden gesteld wordt dat de K_d en S_d niet-lineair gerelateerd zijn aan de mate van absorptie en verstrooiing en er dus ook geen lineaire relaties bestaan tussen K_d en S_d en de optisch actieve componenten, blijken lineaire relaties in de praktijk heel goed te voldoen. De volgende vergelijkingen beschrijven de extinctie van licht, en de Secchi-diepte als lineaire functie van eerder genoemde optische componenten:

De extinctiecoëfficiënt:

$$[1] \quad E_{\text{tot}} = E_0 + \alpha_h \text{Abs}(380) + \alpha_a \text{Chla} + \alpha_d \text{SS}_{\text{det}} + \alpha_m \text{SS}_{\text{min}}$$

waarin:	E_{tot}	extinctiecoëfficiënt (m^{-1})
	E_0	achtergrond extinctie (m^{-1})
	$\text{Abs}(380)$	absorptie licht door opgeloste stoffen bij 380 nm (m^{-1})
	Chla	concentratie chlorofyl-a (mg/l)
	SS_{det}	concentratie organische zwevende stof (detritus) (mg/l)
	SS_{min}	concentratie minerale zwevende stof (mg/l)
	α_h	de bijdrage van humuszuren aan de extinctiecoëfficiënt (-)
	α_a	de bijdrage van chlorofyl-a aan de extinctiecoëfficiënt ($\text{m}^{-1} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{m}^3$)
	α_d	de bijdrage van detritus aan de extinctiecoëfficiënt ($\text{m}^{-1} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{m}^3$)
	α_m	de bijdrage van minerale zwevende stof aan de extinctiecoëfficiënt ($\text{m}^{-1} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{m}^3$)

De Secchi-diepte:

$$[2] \quad S_d^{-1} = S_{d0}^{-1} + \beta_h \text{Abs}(380) + \beta_a \text{Chla} + \beta_d \text{SS}_{\text{det}} + \beta_m \text{SS}_{\text{min}}$$

waarin:	S_d	Secchi-diepte (m)
	S_{d0}	achtergrond Secchi-diepte (m)
	β_h	de bijdrage van humuszuren aan de inverse Secchi-diepte
	β_a	de bijdrage van chlorofyl-a aan de inverse Secchi-diepte ($\text{m}^{-1} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{m}^3$)
	β_d	de bijdrage van detritus aan de inverse Secchi-diepte ($\text{m}^{-1} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{m}^3$)
	β_m	de bijdrage van minerale zwevende stof aan de inverse Secchi-diepte ($\text{m}^{-1} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{m}^3$)

Voor de verschillende meren worden vaak verschillende specifieke coëfficiënten gevonden voor de bijdrage van de optisch actieve componenten aan de extinctie van licht en de vermindering van de zichtdiepte. Door Buiteveld (1990) zijn echter waarden afgeleid, die een redelijke schatting voor veel Nederlandse meren blijken op te leveren (Blom, 1992).

Het model voor het lichtklimaat onder water beschrijft de Secchi-diepte en de extinctiecoëfficiënt als de functie van vier optisch actieve componenten in het water. Deze componenten zijn onderhevig aan transport, productie en afbraak. Een lichtklimaatmodel in DUFLOW zal daarom moeten aansluiten op modellen voor algengroei en/of slibtransport, die al binnen de DUFLOW-omgeving bestaan.

Het lichtklimaatmodel, dat hier wordt gepresenteerd, is toegevoegd aan een het bestaande slibmodel (SLIBMEER) en aan de bestaande eutrofiëringsmodellen (EUTROF1 en EUTROF2). In de bijlagen 1 tot en met 3 zijn voor deze modellen alleen het toegevoegde lichtklimaat model weergegeven. De modelbeschrijvingen van de genoemde modellen staan in de appendix van de DUFLOW-handleiding (EDS, 1995). Overige lacunes, doordat niet alle optisch actieve componenten in de bestaande modellen werden gesimuleerd, worden nu aangevuld door simulatie van de ontbrekende componenten of door aanlevering van de optisch actieve component als extern gegeven aan het model.

6.2.1 Aansluiting op een slibmodel voor ondiepe meren

Het bestaande slibtransportmodel SLIBMEER heeft als uitgangspunt gediend voor het model SLIBM_L. Met het model SLIBMEER wordt de concentratie zwevende stof gesimuleerd ten gevolge van de opwerveling van slib door golven. De optische component algen en de component zwevende stof (mineraal + organisch) worden door SLIBMEER reeds gesimuleerd. In hoofdstuk 5 staat een uitgebreide beschrijving van het model SLIBMEER. Het lichtklimaat SLIBM_L is afgeleid van SLIBMEER, door dit laatste model op de volgende punten uit te breiden:

- de vergelijkingen voor de berekening van de Secchi-diepte en de extinctiecoëfficiënt met de bijbehorende parameters zijn toegevoegd aan het kwaliteitsmodel;
- er is een parameter geïntroduceerd voor de vaste verhouding tussen de organische fractie en de minerale fractie zwevende stof;
- de absorptie van licht bij 380 nm is als externe variabele opgenomen in het kwaliteitsmodel.

In bijlage 1 staat het kwaliteitsmodel SLIBM_L. In hoofdstuk 6.4 wordt een voorbeeld besproken dat is uitgewerkt voor het lichtklimaat in de Noordeinderplas in Nieuwkoop.

6.2.2 Aansluiting op een eutrofiëringsmodel

De bestaande eutrofiëringsmodellen EUTROF1 en EUTROF2 hebben als uitgangspunt gediend voor de lichtklimaatmodellen EUTROF1L en EUTROF2L. Met de modellen EUTROF1 en EUTROF2 worden de optische componenten algen en zwevende stof reeds gesimuleerd. Het lichtklimaatmodel EUTROF1L is ontwikkeld vanuit EUTROF1 door de volgende aanpassingen te maken in het kwaliteitsmodel:

- de vergelijkingen voor de berekening van de Secchi-diepte en de extinctiecoëfficiënt met de bijbehorende parameters zijn toegevoegd aan het kwaliteitsmodel;
- de concentratie detritus wordt afgeleid uit de sterfte en netto sedimentatie van algen;
- een parameter voor de verhouding biomassa/chlorofyl-a;
- de absorptie van licht bij 380 nm is als externe variabele opgenomen in het kwaliteitsmodel.

Het lichtklimaatmodel EUTROF2L is ontwikkeld vanuit EUTROF2 door de volgende aanpassingen te maken in het kwaliteitsmodel:

- de vergelijkingen voor de berekening van de Secchi-diepte en de extinctiecoëfficiënt met de bijbehorende parameters zijn toegevoegd aan het kwaliteitsmodel;
- een parameter voor de verhouding biomassa/chlorofyl-a;
- de netto sedimentatiesnelheid van zwevende stof wordt bepaald uit de bruto sedimentatie en resuspensie van zwevende stof;
- de concentratie detritus wordt afgeleid uit de sterfte en netto sedimentatie van algen;
- de absorptie van licht bij 380 nm is als externe variabele opgenomen in het kwaliteitsmodel.

In bijlage 2 en 3 staan de vergelijkingen die zijn toegevoegd aan EUTROF1 respectievelijk EUTROF2 voor de simulatie van het lichtklimaat onder water. De voorbeelden die voor EUTROF1L en EUTROF2L beschikbaar zijn, worden niet in dit hoofdstuk besproken. De procesbeschrijvingen zijn wel op diskette bijgeleverd.

6.3 Benodigde invoer

In deze paragraaf wordt de invoer beschreven die nodig is voor de berekening van de Secchi-diepte en de extinctiecoëfficiënt.

6.3.1 Parameters

Met de toevoeging van de lineaire vergelijkingen voor de berekening van de extinctiecoëfficiënt en de Secchi-diepte (Buiteveld, 1990) zijn een groot aantal parameters geïntroduceerd. In de tabellen 6.1 en 6.2 staan de parameters die Buiteveld verkreeg voor de randmeren.

Tabel 6.1 De gebruikte parameterwaarden voor de berekening van de extinctiecoëfficiënt.

Parameter	Naam	Waarde	Eenheid
E_0	Achtergrond extinctie	0.627	m^{-1}
α_h	Bijdrage humuszuren aan extinctie	0.0498	-
α_a	Bijdrage algen aan extinctie	0.0209	$m^{-1} \cdot \mu g^{-1} \cdot l$
α_d	Bijdrage detritus aan extinctie	0.0490	$m^{-1} \cdot mg^{-1} \cdot l$
α_m	Bijdrage minerale zwevende stof aan extinctie	0.0253	$m^{-1} \cdot mg^{-1} \cdot l$

Tabel 6.2 De gebruikte parameterwaarden voor de berekening van de Secchi-diepte.

Parameter	Naam	Waarde	Eenheid
S_{d0}	Achtergrond Secchi-diepte	3.31	m
β_h	Bijdrage humuszuren aan inverse Secchi-diepte	0.0107	-
β_a	Bijdrage algen aan inverse Secchi-diepte	0.0111	$m^{-1} \cdot \mu g^{-1} \cdot l$
β_d	Bijdrage detritus aan inverse Secchi-diepte	0.0636	$m^{-1} \cdot mg^{-1} \cdot l$
β_m	Bijdrage minerale zwevende stof aan inverse Secchi-diepte	0.0606	$m^{-1} \cdot mg^{-1} \cdot l$

Det/Min	De verhouding organische stof/minerale zwevende stof kan bepaald worden door van watermonsters het drooggewicht en het asvrij drooggewicht te bepalen; het asgewicht is het verschil tussen het drooggewicht en het asvrij drooggewicht. De verhouding organische/minerale fractie in de zwevende stof is dan gelijk aan de verhouding asgewicht/asvrij drooggewicht. Voor de bepaling van het drooggewicht en asvrij drooggewicht: zie NEN 3235.
ma	de verhouding biomassa/chlorofyl-a volgt uit de verhouding C/chlorofyl-a en de stoichiometrie van algen.

6.3.2 Externe variabelen

De absorptie van licht bij 380 nm is een maat voor de hoeveelheid Gelbstoff in het water. Gelbstoffen zijn opgeloste afbraakproducten van organische stof, waaronder waterplanten en algenmateriaal, die niet door filtratie over een 0.45 micrometer filter verwijderd worden uit een watermonster. De absorptie van licht door Gelbstoff in het gefiltreerde water wordt gemeten met een spectrofotometer bij een golflengte van 380 nanometer. De absorptiecoëfficiënt volgt uit de formule (Jeurink en Icke, 1996):

$$[3] \quad \text{Abs}(380) = \frac{A \cdot \ln 10}{l}$$

waarin:	Abs(380)	de absorptiecoëfficiënt van Gelbstoff (m ⁻¹)
	A	de gemeten absorbantie bij 380 nm (-)
	l	de weglengte van het cuvet in de spectrofotometer (m)

6.4 Voorbeeld Noordeinderplas, Nieuwkoop

6.4.1 Situatieschets

Om het DUFLOW kwaliteitsmodel SLIBM_L te demonstreren is een voorbeeld ontleend aan de praktijk: de Noordeinderplas te Nieuwkoop. De Noordeinderplas is ontstaan na veenwinning en heeft een gemiddelde diepte van 2,5 meter. Op de bodem ligt een 5,5 cm dikke laag slib dat opwerfelt tijdens stormachtige periodes. Dit heeft hoge concentraties zwevende stof tot gevolg, met negatieve gevolgen voor het lichtklimaat. Er is een voorbeeld uitgewerkt waarin de uitdoving van licht door opgewerveld zwevende stof wordt gesimuleerd tijdens een periode met hoge windsnelheden. De optische componenten algen en Gelbstoff worden constant verondersteld tijdens de simulatie periode; de Noordeinderplas is geschematiseerd als een gesloten systeem. De invloed van opgewervelde zwevende stof op de extinctiecoëfficiënt en de Secchi-diepte is hierdoor direct inzichtelijk.

6.4.2 Duflow invoer

HET NETWERK

Het netwerk van kanalen, waarmee de Noordeinderplas is geschematiseerd, is hetzelfde als voor het de demonstratie van de module SLIBMEER is gebruikt in hoofdstuk 5.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities zwevende stof zijn gelijk gesteld aan de defaultwaarden die in het kwaliteitsmodel zijn gedefinieerd.

RANDVOORWAARDEN

Er zijn geen randvoorwaarden opgelegd. De Noordeinderplas is voor dit voorbeeld geschematiseerd als een gesloten systeem, zonder uitwisseling met de omgeving.

PARAMETERS

Voor de parameters in de vergelijkingen voor de Secchi-diepte en de extinctiecoëfficiënt is gebruik gemaakt van de waarden die zijn afgeleid door Buiteveld (1990) voor de randmeren: zie hiervoor tabel 6.1 en tabel 6.2. Voor de verhouding tussen de organische en de minerale fractie zwevende stof is een gemiddelde waarde van 0.20 (-) gemeten tijdens een twee maanden durende meetcampagne in de Noordeinderplas (Icke en Jeurink, 1996).

EXTERNE VARIABELEN

De volgende twee externe variabelen zijn voor de studie naar het lichtklimaat onder water van belang:

- de concentratie chlorofyl-a in het water, deze is tijdens de periode die in dit voorbeeld wordt gesimuleerd tweemaal gemeten en bedroeg gemiddeld 80 (mgChl-a.l⁻¹) (Van de Kerk, 1995);
- de absorptie van licht bij 380 nm, deze is twee maal gemeten tijdens de simulatieperiode en was gemiddeld 8.50 (m⁻¹) (Van de Kerk, 1995).

CALCULATION SETTINGS

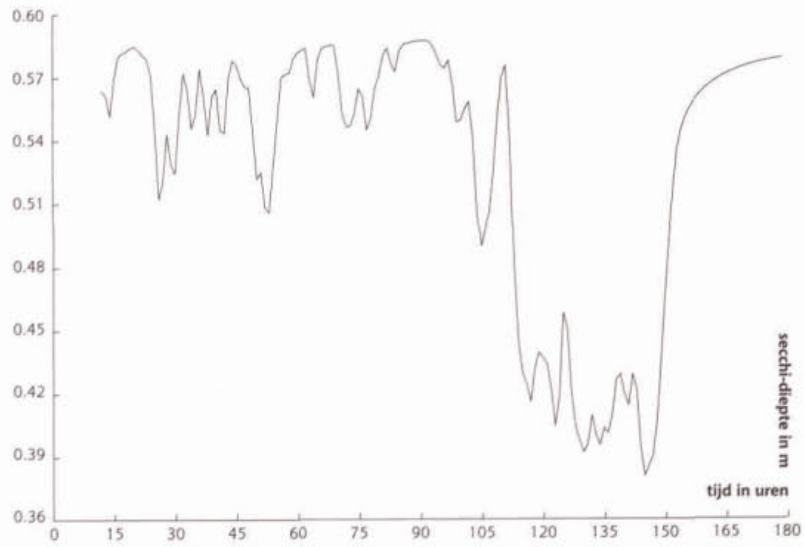
Er wordt gerekend met een tijdstap voor de waterbeweging van 10 min, de tijdstap voor de simulatie van de kwaliteit is 20 min. De totale duur van de gesimuleerde periode is 8 dagen, met een uitvoerinterval van 1 uur. Voor alle secties wordt de uitvoer weergegeven. Alle kwaliteitsvariabelen worden uitgevoerd, inclusief de functies SStot (totaal zwevende stof concentratie), secchi (de Secchi-diepte) en extinct (de extinctiecoëfficiënt).

6.4.3 Resultaten

In figuren 6.1 en 6.2 zijn voor sectie 20 de gesimuleerde functies Secchi-diepte en extinctiecoëfficiënt gepresenteerd. In de figuren is de afname van de zichtdiepte tijdens een episode van hoge windsnelheden duidelijk zichtbaar. De extinctiecoëfficiënt, de maat voor de uitdoving van licht, neemt toe ten gevolge van de verhoogde zwevende stof concentraties.

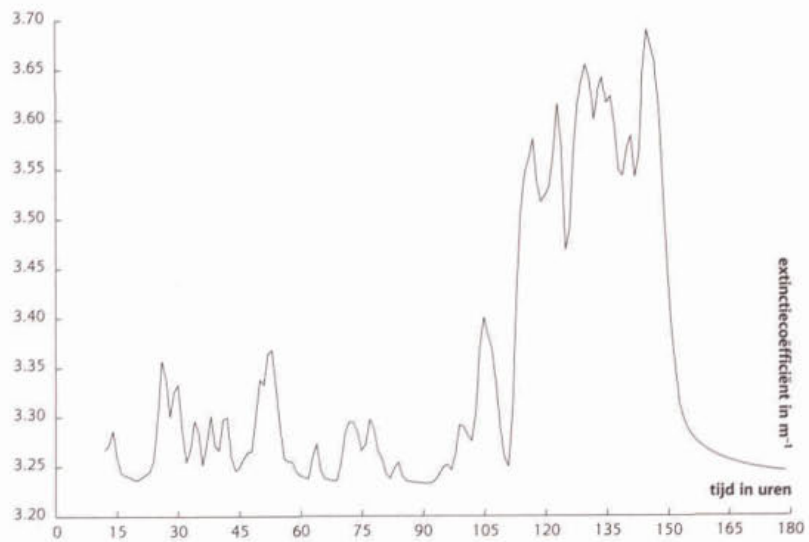
Figuur 6.1

De gesimuleerde Secchi-diepte (m) in sectie 20,
van 26 oktober 1995 tot en met 2 november 1995



Figuur 6.2

De gesimuleerde extinctiecoëfficiënt (m^{-1}) in sectie 20,
van 26 oktober 1995 tot en met 2 november 1995



Literatuur

Blom, G., 1992. Licht onder water. Het belang van extinctiemetingen. LU Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie.

Blom, G., Hekkink A., 1994. Lichtklimaat in ondiepe meren, Onderzoek naar de toepasbaarheid van het model UITZICHT en modellen voor de resuspensie van bodemmateriaal, LU Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie.

Buiteveld, H., 1990. Uitzicht, een model voor berekening van doorzicht en extinctie. Lelystad: Rijkswaterstaat, Dienst Binnenwateren/RIZA, notanummer 90.058.

Icke, J. en M.H.B. Jeurink, 1996. De invloed van slib op het lichtklimaat in de Nieuwkoopse Plassen, LU Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie, doctoraalverslag nr. 023/96.

Kerk, I.F. van de, 1995, Resuspensie, sedimentatie en lichtklimaat in de Nieuwkoopse Plassen, LU Wageningen, Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie, doctoraalverslag nr. 020/95.

STOWA 1998. Duflow for Windows, Stowarapport 98-19.

■ Bijlage 1

Procesbeschrijvingen lichtklimaat (SLIBM_L.MOD)

/*				*/
/*	MODEL SLIBM_L			*/
/*	Massabalans voor 3 slibfracties in de waterfase en in de bodem.			*/
/*	Geschreven voor de Noordeinderplas te Nieuwkoop			*/
/*	Uitbreiding met de lineaire vergelijkingen voor de extinctie-			*/
/*	coëfficiënt en de Secchi-diepte			*/
/*	STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW			*/
/*				*/
/*	Toelichting gebruikte functies:			*/
/*	resflux	g/m2dag		;resuspensieflux
/*	SStot	g/m3		;concentratie zwevende stof
/*	sliblaag	cm		;dikte sliblaag op de bodem
/*	SSmin	g/m3		;concentratie minerale fractie zwevende stof
/*	SSdet	g/m3		;concentratie organische fractie zwevende stof
/*	Secchi	m		;Secchi-diepte
/*	Extinct	1/m		;extinctie coëfficiënt
/*				*/
/*	Landbouwniversiteit Wageningen			*/
/*	Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie			*/
/*	Postbus 8080			*/
/*	6700 DD Wageningen			*/
/*				*/
water	SS1	[0.00]	g/m3	;concentratie fractie 1 in water
water	SS2	[0.00]	g/m3	;concentratie fractie 2 in water
water	SS3	[0.00]	g/m3	;concentratie fractie 3 in water
bottom	dikte1	[0.65]	cm	;slibdikte fractie 1
bottom	dikte2	[0.75]	cm	;slibdikte fractie 2
bottom	dikte3	[4.10]	cm	;slibdikte fractie 3
parm	dt	[0.01389]	dag	;tijdstep kwaliteitsberekening
parm	E0	[0.627]	1/m	;achtergrond extinctie
parm	Eabs	[0.0498]	-	;bijdrage humuszuren aan extinctie
parm	Ealg	[0.0209]	m3/mg.m	;bijdrage algen aan extinctie
parm	Edet	[0.0490]	m3/g.m	;bijdrage detritus aan extinctie
parm	Emin	[0.0253]	m3/g.m	;bijdrage minerale zwevende stof aan extinctie
parm	Kres1	[43.20]	gSS/m3.dag	;resuspensie constante fractie 1
parm	Kres2	[112.3]	gSS/m3.dag	;resuspensie constante fractie 2
parm	Kres3	[1728]	gSS/m3.dag	;resuspensie constante fractie 3
parm	ma	[0.07]	g/mg	;verhouding biomassa/chlorofyl-a
parm	Sd0	[3.31]	m	;achtergrond Secchi-diepte
parm	Sdabs	[0.0107]	-	;bijdrage humuszuren aan inverse Secchi-diepte
parm	Sdalg	[0.0111]	m3/g.m	;bijdrage algen aan inverse Secchi-diepte
parm	Sddet	[0.0636]	m3/g.m	;bijdrage detritus aan inverse Secchi-diepte
parm	Sdmin	[0.0606]	m3/g.m	;bijdrage minerale zwevende stof aan inverse Secchi-
diepte				
parm	ro1	[1000]	g/m2cm	;dichtheid fractie 1 in bodem
parm	ro2	[1000]	g/m2.cm	;dichtheid fractie 2 in bodem
parm	ro3	[1000]	g/m2.cm	;dichtheid fractie 3 in bodem
parm	Ubcrl	[0.00001]	m/sec	;kr orbitaalsnelheid fractie 1
parm	Ubcrl	[0.0001]	m/sec	;kr orbitaalsnelheid fractie 2
parm	Ubcrl	[0.001]	m/sec	;kr orbitaalsnelheid fractie 3
parm	Ws1	[1.00]	m/dag	;valsnelheid fractie 1
parm	Ws2	[5.00]	m/dag	;valsnelheid fractie 1
parm	Ws3	[40.0]	m/dag	;valsnelheid fractie 3
xt	Abs	[8.50]	1/m	;absorptie bij 380 nm
xt	Chla	[80.0]	mg/m3	;concentratieentratie chlorofyl-a
xt	DetMin	[0.20]	-	;verhouding detritus/mineraal in SS
xt	Ssa	[10.0]	g/m3	;achtergrondconcentratie zwevende stof
xt	Ub	[0.100]	m/sec	;orbitaalsnelheid aan de bodem

```

flow      Z      [1.000]      m      ;diepte

{
if (Ub>Ubcrl && (ro1*dikte1) >= (dt*Kres1*(Ub-Ubcrl)))
{
resflux1 = Kres1*(Ub-Ubcrl);
}
else if (Ub>Ubcrl && (ro1*dikte1) < (dt*Kres1*(Ub-Ubcrl)))
{
resflux1 = (ro1*dikte1)/dt;
}
else
{
resflux1 = 0;
}

k0(SS1) = resflux1/Z;
k1(SS1) = -Ws1/Z;
k0(dikte1) = ((Ws1*SS1)-resflux1)/ro1;

if (Ub>Ubcrl && (ro2*dikte2) >= (dt*Kres2*(Ub-Ubcrl)))
{
resflux2 = Kres2*(Ub-Ubcrl);
}
else if (Ub>Ubcrl && (ro2*dikte2) < (dt*Kres2*(Ub-Ubcrl)))
{
resflux2 = (ro2*dikte2)/dt;
}
else
{
resflux2=0;
}

k0(SS2) = resflux2/Z;
k1(SS2) = -Ws2/Z;
k0(dikte2) = ((Ws2*SS2)-resflux2)/ro2;

if (Ub>Ubcrl && (ro3*dikte3) >= (dt*Kres3*(Ub-Ubcrl)))
{
resflux3 = Kres3*(Ub-Ubcrl);
}
else if (Ub>Ubcrl && (ro3*dikte3) < (dt*Kres3*(Ub-Ubcrl)))
{
resflux3 = (ro3*dikte3)/dt;
}
else
{
resflux3 = 0;
}

k0(SS3) = resflux3/Z;
k1(SS3) = -Ws3/Z;
k0(dikte3) = ((Ws3*SS3)-resflux3)/ro3;

SStot = SSa + SS1 + SS2 + SS3;
sliblaag = dikte1 + dikte2 + dikte3;

SSmin = (SStot - ma * Chla) / (1 + DetMin);
SSdet = SStot - ma * Chla - SSmin;

Extinct = E0 + (Eabs * Abs) + (Ealg * Chla) + (Edet * SSdet) + (Emin * SSmin);
Secchi = 1/((1/Sd0) + (Sdabs * Abs) + (Sdalg * Chla) + (Sddet * SSdet) + (Sdmin * SSmin));
}

```


■ Bijlage 2

Procesbeschrijvingen lichtklimaat (EUTROF1L.MOD)

```

/* */
/* MODEL EUTROF1L */
/* Lineaire vergelijkingen voor de bepaling van de secchi diepte en de */
/* extinctiecoëfficiënt */
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
/* */
/* Landbouwniversiteit Wageningen */
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
/* Postbus 8080 */
/* 6700 DD Wageningen */
/* */

```

water	DET	[1.000]	mg/l	:concentratie detritus
parm	E0	[0.627]	1/m	:achtergrond extinctie
parm	Eabs	[0.0498]	-	:bijdrage humuszuren aan extinctie
parm	Ealg	[0.0209]	m3/g.m	:bijdrage algen aan extinctie
parm	Edet	[0.0490]	m3/g.m	:bijdrage detritus aan extinctie
parm	Ess	[0.0253]	m3/g.m	:bijdrage zwevend stof aan extinctie
parm	ma	[1.884]	g-alg/g-C	:algenbiomassa/koolstof verhouding
parm	Sd0	[3.31]	m	:achtergrond secchi diepte
parm	Sdabs	[0.0107]	-	:bijdrage humuszuren aan inverse secchi diepte
parm	Sdalg	[0.0111]	m3/mg.m	:bijdrage algen aan inverse secchi diepte
parm	Sddet	[0.0636]	m3/g.m	:bijdrage detritus aan inverse secchi diepte
parm	Sdss	[0.0606]	m3/g.m	:bijdrage zwevend stof aan inverse secchi diepte
xt	Abs	[8.50]	1/m	:licht absorptie bij 380 nm

```

{
k0(DET)=Resp*A*ma;
K1(DET)=-1*mino-sedo;

```

```

Etot=E0 + Ealg*Chla + Ess*SS + Edet*DET + Eabs*abs ;
Secchi=1/((1/Sd0) + Sdalg*Chla + Sdss*SS + Sddet*DET + Sdabs*Abs);
}

```

■ Bijlage 3

Procesbeschrijvingen lichtklimaat (EUTROF2L.MOD)

```

/* */
/* MODEL EUTROF2L */
/* Lineaire vergelijkingen voor de bepaling */
/* van de secchi diepte en de extinctiecoëfficiënt */
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
/* */
/* Landbouwniversiteit Wageningen */
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
/* Postbus 8080 */
/* 6700 DD Wageningen */
/* */

```

water	DET	[1.00]	g/m3	:concentratie detritus
parm	E0	[0.627]	1/m	:achtergrond extinctie
parm	Eabs	[0.0498]	-	:bijdrage humuszuren aan extinctie
parm	Ealg	[0.0209]	m3/g,m	:bijdrage algen aan extinctie
parm	Edet	[0.0490]	m3/g,m	:bijdrage van detritus aan extinctie
parm	Ess	[0.0253]	m3/g,m	:bijdrage zwevend stof aan extinctie
parm	ma	[1.884]	g alg/g C	:algenbiomassa/koolstof verhouding
parm	Sd0	[3.31]	m	:achtergrond secchi diepte
parm	Sdabs	[0.0107]	-	:bijdrage humuzuren aan inverse secchi diepte
parm	Sdalg	[0.0111]	m3/mg,m	:bijdrage algenbiomassa aan inverse secchi diepte
parm	Sddet	[0.0636]	m3/g,m	:bijdrage detritus aan inverse secchi diepte
parm	Sdss	[0.0606]	m3/g,m	:bijdrage zwevend stof aan inverse secchi diepte
xt	Abs	[8.50]	1/m	:absorptie van licht bij 380 nm

```

{
Vsnet = (Fsed-Fres)/SSw;

```

```

k0(DET) = RespT*ma;
k1(DET) = -1*mino-Vsnet;

```

```

Etot = E0 + Ealg*Chla + Eabs*Abs + Ess*SSw + Edet*DET;
Secchi = 1/((1/Sd0) + Sdalg*Chla + Sdabs*Abs + Sdss*SSw + Sddet*DET);
}

```


PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

EUTROF1A

mei 1997

hoofdstuk

7

R.H. Alderink

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

7

Inhoudsopgave

7.1 EUTROF1A 5

7.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen 5

7.2 Procesbeschrijvingen 6

7.2.1 Beschrijving algenbalans 7

7.2.2 Beschrijving fosfaathuishouding 10

7.2.3 Beschrijving stikstofhuishouding 11

7.3 Benodigde invoer 11

7.3.1 Initiële condities 13

7.3.2 Randvoorwaarden 13

7.3.3 Parameters 13

7.3.4 Externe variabelen 15

7.4 Uitvoer 15

7.5 Voorbeeld 16

7.5.1 Situatieschets 16

7.5.2 DUFLOW invoer 17

7.5.3 Resultaten 18

Literatuur 20

Bijlagen

Bijlage 1 Procesbeschrijvingen EUTROF1A (EUTROF1A.MOD) 21

7.1 EUTROF1A

Binnen de serie eutrofiëringsmodellen in DUFLOW is EUTROF1A het meest eenvoudige model. De set procesbeschrijvingen is afgeleid van EUTROF1 een model dat standaard met DUFLOW wordt meegeleverd. Vergeleken met dit bestaande model is de set procesbeschrijvingen vereenvoudigd. De belangrijkste wijziging betreft de beschrijving van de fosfaathuishouding. Deze is aangepast, waardoor de randvoorwaarden voor de toestandsgrootheden beter aansluiten bij de veldmetingen. Een ander belangrijk verschil is, dat in EUTROF1A de zuurstofhuishouding niet meer is beschreven. Hierdoor zijn alle processen in EUTROF1A impliciet ongevoelig geworden voor zuurstof. Daarmee is EUTROF1A een eenvoudig model geworden, dat zich richt op de beschrijving van nutriëntenkringlopen en algenbiomassa. Evenals in EUTROF1 wordt de uitwisseling van nutriënten tussen het sediment en de bovenstaande waterkolom niet beschreven. Er kunnen slechts naleveringsfluxen worden opgelegd.

Uitgangspunt voor EUTROF1A is een zo eenvoudig mogelijk model neer te zetten, waarmee in de praktijk een redelijke schatting van de algenbiomassa kan worden verkregen en waarmee gehalten aan nutriënten kunnen worden voorspeld. Gekozen is voor deze opzet om het aantal parameters en variabelen te verkleinen, waardoor het gebruiksgemak wordt vergroot, terwijl de schatting voldoende betrouwbaar blijft.

7.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen

Door de eenvoudige opzet van EUTROF1A zijn het aantal toepassingen beperkt. Hieronder worden de toepassingen en de beperkingen van het model weergegeven.

Toepassingen voor het model:

- Simulaties van algen en nutriënten over kleine tijdschalen (van enkele weken tot een maand).
- Evaluatie van maatregelen, zoals het doorspoelen en het uitdiepen van watersystemen.
- Nagaan van het effect van nutriëntenlimitatie op het systeem.

Beperkingen van het model:

- Bij toepassing over kleine tijdschalen moet men zich realiseren, dat EUTROF1 een eenvoudig model is en de werkelijkheid veel complexer is. Zo is onder meer bekend dat algen zich aanpassen aan zich wijzigende lichtcondities en mengregimes, en een variabele C/Chl-a verhouding kunnen hebben. Processen, die geen van allen in dit model worden meegenomen.
- Het model is niet geschikt om het lange termijn effect van een verminderde externe belasting te simuleren, doordat de sediment-water interactie niet dynamisch is beschreven.
- EUTROF1A beschrijft de groei van één soort alg, die representatief is voor de gehele fytoplanktongemeenschap. Met name in wateren waarin successie optreedt is dit een zeer ruwe benadering.
- Tenslotte is de netto sedimentatie in het model niet dynamisch beschreven. Veranderingen in de stromingsvariabelen zoals debiet hebben daardoor geen doorwerking op de netto sedimentatie.

7.2 Procesbeschrijvingen

In het model worden de volgende toestandsvariabelen onderscheiden:

A	Algenbiomassa
DP	Opgelost fosfaat (representeert het orto-P)
PP	Particulair fosfaat
N _{org}	Organisch gebonden stikstof
NH ₄	Ammoniumstikstof
NO ₃	Nitraatstikstof

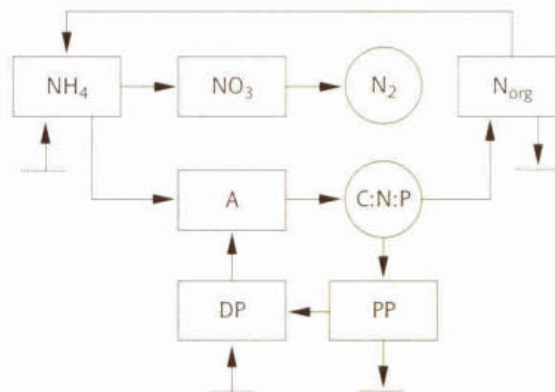
In figuur 7.1 wordt een overzicht gegeven van de interacties tussen de toestandsvariabelen in het model. Het model beschrijft naast de algenbiomassa de kringlopen van stikstof en fosfaat.

Aan de stikstofhuishouding liggen drie processen ten grondslag, dit zijn mineralisatie, nitrificatie en denitrificatie.

- Bij het eerste proces, mineralisatie, wordt organisch gebonden stikstof afgebroken tot ammonium. Dit proces wordt ook wel ammonificatie genoemd.
- Het tweede proces, nitrificatie, verloopt eigenlijk in twee stappen, waarbij ammonium onder aërobe condities door bacteriën wordt omgezet in nitraat. Als tussenproduct ontstaat nitriet (NO₂). Daar de omzetting van nitriet tot nitraat veel sneller gaat dan de omzetting van ammonium tot nitriet, is het nitrificatie proces in EUTROF1A als een één stapproces beschreven.
- Tenslotte kan nitraat worden omgezet in vrije stikstof (N₂). Dit proces wordt denitrificatie genoemd en verloopt onder zuurstofarme condities, waardoor denitrificatie in de waterkolom veelal te verwaarlozen is. Denitrificatie vindt vooral plaats in sedimentlagen en in biofilms.

In de praktijk worden vaak concentraties aan Kjeldahl stikstof en totaal stikstof geïmplementeerd. De Kjeldahl stikstof concentratie is gelijk aan de som van het organisch gebonden stikstof, de stikstof in de algen en de ammoniumstikstof. Totaal stikstof is de som van alle onderscheiden vormen van stikstof. Beide grootheden kunnen na selectie als uitvoervariabele worden berekend (zie paragraaf 7.4 Uitvoer).

Figuur 7.1 Interacties tussen de toestandsvariabelen



In de fosfaathuishouding maakt het model slechts onderscheid tussen twee vormen van fosfaat. Dit zijn het opgelost fosfaat (DP), representatief voor het in de praktijk gemeten orto-fosfaat, en het particulier gebonden fosfaat (PP). Het DP wordt anders dan PP opgenomen door algen. Daarnaast beïnvloeden sedimentatie en resuspensie het lot van PP dit in tegenstelling tot DP dat alleen door dispersie en advectie wordt beïnvloedt. De sedimentatie in dit model is het netto verschil tussen sedimentatie en resuspensie en wordt als constante ingevoerd. In het EUTROF2a model zijn beide processen wel apart beschreven. Voor een beschrijving daarvan wordt naar hoofdstuk 8 verwezen.

Ook de nalevering van fosfaat vanuit de waterbodem is niet in dit model beschreven. Wel kan de gebruiker een naleveringsflux opgeven, waarbij wordt aangenomen, dat het nageleverde fosfaat in opgeloste vorm vrijkomt. Men moet zich realiseren, dat hierdoor de gekozen beschrijving voor de fosfaathuishouding slechts een vereenvoudigde weergave is van de werkelijkheid. Voor een complexere beschrijving wordt verwezen naar het EUTROF2 model.

In de praktijk wordt vaak het totaal fosfaatgehalte (P-tot) gerapporteerd. Binnen EUTROF1A is deze grootte een uitvoervariabele (zie 7.4 Uitvoer), waarbij het totaal fosfaatgehalte de som is van DP, PP en het fosfaat in de algen.

7.2.1 Beschrijving algenbalans

De algenbalans wordt gevormd door groei en verliezen aan algen. De groei van algen wordt gelimiteerd door nutriënten, licht en temperatuur.

$$[1] \quad \frac{dA}{dt} = [\mu_{\max} F_T F_N F_L] A - k_{\text{loss}} A$$

Waarin:	A	algenbiomassa (g C.m ⁻³)
	μ_{\max}	maximale groeisnelheid (dag ⁻¹)
	F_T	temperatuur limitatiefactor (-)
	F_N	nutriënten limitatiefactor (-)
	F_L	licht limitatiefactor (-)
	k_{loss}	snelheidsconstante voor verlies (dag ⁻¹)

De constante k_{loss} , representeert de som van alle verliestermen in de algenbalans. Het gaat hier om verliezen door respiratie, afsterving en graas door zoöplankton. Deze verliestermen worden in EUTROF1 en EUTROF2 verder uitgesplitst. De toestandsvariabele A, die de algenbiomassa voorstelt, wordt uitgedrukt in g C. m⁻³. Door gebruik te maken van een constante C/Chl-a verhouding kan de biomassa ook worden uitgedrukt in mg Chl-a.l⁻¹ (zie Hoofdstuk 7.4 Uitvoer).

De limitatiefactoren van de nutriënten zijn beschreven met de zogenaamde Monod vergelijking. Hieronder is een algemene representatie van de Monod vergelijking weergegeven.

$$[2] \quad F_{\text{NUTR}} = \frac{\text{NUTR}}{\text{NUTR} + K_{\text{NUTR}}}$$

Waarin K_{nutr} de Monod constante is en NUTR het nutriëntgehalte. De Monod constante heeft de dimensie van een concentratie (g.m⁻³). Voor de vergelijking geldt dat de

limitatiefactor de groeisnelheid van de algen minder afremt naarmate de nutriëntconcentraties toenemen. Zo bedraagt bij een concentratie gelijk aan K_{NUTR} de groeisnelheid de helft van de ongelimiteerde maximale groeisnelheid. Doordat zowel stikstof als fosfaat limiterend voor de groei kunnen zijn, worden in het model beide Monod limitatiefactoren uitgerekend. De groeisnelheid wordt vervolgens bepaald door de meest limiteerde nutriënt:

$$[3] \quad F_N = \min \left[\frac{DP}{DP + K_P}, \frac{NH_4}{NH_4 + K_N} \right]$$

Door de beschrijvingswijze van de stikstof limitatiefactor heeft het model als uitgangspunt, dat de algen ammonium preferent opnemen voor hun groei. Bij lage concentraties ammonium kan echter ook nitraat als stikstofbron worden opgenomen. Dit houdt in dat als het model stikstof limitatie voorspelt, enige voorzichtigheid is geboden met betrekking tot de voorspelde algenbiomassa. In EUTROF1 wordt door de introductie van een zogenaamde ammonium preferentiefactor de voorkeur van de alg voor de stikstofbron afhankelijk gesteld van de concentraties aan ammonium en nitraat. In veel gevallen is stikstof in het geheel niet limiterend, doordat ammonium in voldoende mate aanwezig is. Om deze reden is in dit model gekozen voor een eenvoudiger voorstelling van zaken.

Lichtlimitatie wordt in het model beschreven met een over de dag en diepte gemiddelde limitatiefactor. In het model moet gekozen worden tussen de lichtlimitatie van Smith (1936) en de lichtlimitatie volgens Steele (1962).

$$[4] \quad F_L = \frac{1}{\epsilon_{tot} z} \cdot \frac{L}{24} \left[\ln \left(\alpha \cdot I_{0,max} + \sqrt{1 + (\alpha \cdot I_{0,max})^2} + \frac{1 - \sqrt{1 + (\alpha \cdot I_{0,max})^2}}{\alpha \cdot I_{0,max}} \right) \right]$$

waarin:

α	constante; initiële helling (-)
ϵ_{tot}	totale extinctie (m^{-1})
$I_{0,max}$	max. lichtintensiteit ($W \cdot m^{-2}$)
L	daglengte (uur)
z	diepte (meter)

In vergelijking 4 is uitgegaan van een relatie volgens Smith, die de remming van de groeisnelheid door lichtintensiteit beschrijft. In dit verband treedt alleen lichtverzwakking op bij hoge intensiteiten (zie vergelijking 5). De grootte α (in $m^2 W^{-1}$; orde van grootte 0,02-0,05) is een constante maat voor de initiële helling van de curve van $m(I)$ tegen I ; eigenlijk is dit geen constante, omdat algen zich aanpassen aan de lichtgeschiedenis. Na een langere periode in het donker wordt de curve steiler (en α groter). In het model worden deze adaptatieverschijnselen echter niet beschreven. In vergelijking 4 is verder aangenomen, dat de verdeling van het licht over de daglichtperiode driehoekig is en dat nabij de bodem praktisch geen licht meer aanwezig is (optisch oneindig diep water). De vergelijking van Smith:

$$[5] \quad \mu(I) = \mu_{max} \frac{\alpha \cdot I}{\sqrt{1 + (\alpha \cdot I)^2}}$$

waarin: I lichtintensiteit ($W \cdot m^{-2}$)

is meestal goed bruikbaar, omdat lichtremming onder Nederlandse condities meestal niet van grote betekenis is. In vergelijking 4 kan rekening worden gehouden met de zelfbeschaduwning door de (toenemende) algenbiomassa. Dit gebeurt door de totale extinctie te schrijven als:

$$[6] \quad \epsilon_{\text{tot}} = \epsilon_0 + \epsilon_{\text{alg}} \text{Chl} - a$$

Hierin is de constante ϵ_{alg} , de specifieke extinctie van de algen. Afhankelijk van de algensoort bedraagt deze ca. 0,015-0,021 m² / mg Chl-a. ϵ_0 is de achtergrond extinctie van het water zonder algen, maar met humus etc. Het chlorofylgehalte (Chl-a) wordt in EUTROF1A niet rechtstreeks als toestandsvariabele uitgerekend. Het model leidt het chlorofylgehalte af door vermenigvuldiging van de algenbiomassa, uitgedrukt in koolstof, en een vaste chlorofyl/koolstof verhouding (a_{ca}).

In EUTROF1 wordt een alleen over de diepte gemiddelde groeisnelheid gebruikt, zodat het mogelijk is het aan de algengroei gerelateerde dag-/nachtritme in de zuurstofproductie te simuleren. Daar in EUTROF1A zuurstof niet wordt gesimuleerd wordt in dit model ook met een over de dag gemiddelde groeisnelheid gerekend.

Is er sprake van foto-inhibitie door hoge lichtintensiteiten nabij het wateroppervlak, dan kan in plaats van de vergelijking van Smith de relatie van Steele worden gebruikt:

$$[7] \quad \mu(I) = \mu_{\text{max}} \cdot \frac{I}{I_{\text{opt}}} \exp\left(1 - \frac{I}{I_{\text{opt}}}\right)$$

waarvan de over de dag en diepte gemiddelde waarde gelijk is aan:

$$[8] \quad F_L = \frac{e}{\epsilon_{\text{tot}} z} \cdot \frac{L}{24} \frac{I_{\text{opt}}}{I_{0,\text{max}}} \cdot \left[\exp(\epsilon_{\text{tot}} z) \left(1 - \exp\left(\frac{I_{0,\text{max}}}{I_{\text{opt}}} \cdot e^{-\epsilon_{\text{tot}} z}\right) \right) - 1 + \exp\left(-\frac{I_{0,\text{max}}}{I_{\text{opt}}}\right) \right]$$

De optimale lichtintensiteit I_{opt} is de parameter die de vorm van de curve van μ tegen I bepaalt, bij $I = I_{\text{opt}}$ is $\mu = \mu_{\text{max}}$. I_{opt} is dus vergelijkbaar met de grootheid α uit de relatie van Smith. Als beide curves (Smith en Steele) dezelfde initiële helling hebben dan geldt dat $I_{\text{opt}} = e/a$. In EUTROF1A kan optioneel gebruik worden gemaakt van de vergelijking volgens Smith (vergelijking 4) of de relatie volgens Steele (vergelijking 8).

$I_{0,\text{max}}$ is de maximale lichtintensiteit in W.m⁻², op een dag. Berekening van $I_{0,\text{max}}$ volgt uit de dagsom van de instraling, waarbij wordt aangenomen dat de verdeling van het licht driehoekig is over de daglichtperiode. Er geldt:

$$[9] \quad I_{0,\text{max}} = \frac{2 \cdot I_{\text{som}}}{L}$$

De temperatuur limitatiefactor wordt gegeven door:

$$[10] \quad F_T = \theta_{\text{ga}}^{(T-20)}$$

Vergelijking 10 is een algemene vergelijking voor processen die afhankelijk zijn van de temperatuur. De temperatuurcoëfficiënt θ_{ga} is de maat waarmee de groeisnelheid van algen verandert en is gedefinieerd bij een graad temperatuurverschil.

7.2.2 Beschrijving stikstofhuishouding

De vergelijking voor organische gebonden stikstof wordt gegeven door:

$$[11] \quad \frac{dN_{org}}{dt} = -k_{min} \theta_{min}^{(T-20)} N_{org} - \frac{V_{so}}{z} N_{org} + k_{loss} a_{NC} A$$

waarin: k_{min} snelheidsconstante voor de mineralisatie van organische stof (dag^{-1})
 θ_{min} temperatuurcoëfficiënt voor de mineralisatie van organische stof (-)
 V_{so} sedimentatiesnelheid van organische stof ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)
 z waterdiepte (m)
 a_{NC} constante stikstof/koolstof verhouding in de algen ($\text{g N} \cdot \text{g C}^{-1}$)

Organische stikstof (N_{org}) komt vrij bij afsterving en respiratie van algen. Er wordt in dit model aangenomen dat al het organisch gebonden stikstof onderhevig is aan sedimentatie. Bij de mineralisatie van organische stof komt de gebonden stikstof vrij als ammonium.

De ammoniumconcentratie wordt beschreven door:

$$[12] \quad \frac{dNH_4}{dt} = -k_{nit} \theta_{nit}^{(T-20)} NH_4 + k_{min} \theta_{min}^{(T-20)} N_{org} - \mu_{max} F_T F_N F_L a_{NC} A + \frac{N_{flux}}{Z}$$

waarin: k_{nit} snelheidsconstante voor de nitrificatie (dag^{-1})
 θ_{nit} temperatuurcoëfficiënt voor de nitrificatie (-)
 N_{flux} naleveringsflux van ammonium uit het sediment ($\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$)

Ammonium komt vrij bij de mineralisatie van organische stof, wordt opgenomen door de algen en kan worden verwijderd door nitrificatie. Nitrificatie is een proces dat kan worden geremd bij lage zuurstofconcentratie. In EUTROF1 wordt dit effect beschreven. In dit model wordt er echter vanuit gegaan, dat er altijd voldoende zuurstof aanwezig is, zodat geen limitatie van de nitrificatiesnelheid optreedt. Nalevering van stikstof uit de bodem kan in rekening worden gebracht met een door de gebruiker op te geven flux. Deze flux kan als functie van de tijd worden opgegeven.

Nitraat wordt in het model door de volgende vergelijking beschreven:

$$[13] \quad \frac{dNO_3}{dt} = -k_{den} \theta_{den}^{(T-20)} NO_3 + k_{nit} \theta_{nit}^{(T-20)} NH_4$$

waarin: k_{den} snelheidsconstante voor de denitrificatie (dag^{-1})
 θ_{den} temperatuurcoëfficiënt voor de denitrificatie (-)

Nitraat wordt gevormd bij de nitrificatie en kan door denitrificatie gereduceerd worden tot vrije stikstof. Dit laatste proces verloopt alleen onder anaërobe condities en zal dus als zodanig niet of nauwelijks in de waterkolom plaatsvinden. Het proces speelt zich vooral af in de sedimentlaag en in allerlei biofilms. Het denitrificatieproces is opgenomen in het model om de verliezen aan nitraat op andere wijze dan afvoer in rekening te kunnen brengen.

7.2.3 Beschrijving fosfaathuishouding

De beschrijving van de fosfaathuishouding is ontleend aan het model SIMBAL (Van Straten, 1986) en bestaat uit de vergelijking voor particulier P en de vergelijking voor opgelost P.

De vergelijking voor particulier P is gegeven door:

$$[14] \quad \frac{dPP}{dt} = -k_{\min} \theta_{\min}^{(T-20)} PP - \frac{V_{so}}{z} PP + k_{\text{loss}} a_{PC} A$$

waarin: a_{PC} constante fosfaat/koolstof verhouding in de algen (g P/g C^{-1})

In deze modelvergelijking zijn dezelfde termen terug te vinden als in de vergelijking voor organisch gebonden stikstof (vergelijking 11). Particulair P wordt gevormd door verliezen aan algen en verdwijnt door mineralisatie en sedimentatie. Deze eenvoudige beschrijving van de fosfaatbalans gaat alleen op als het particulier P voornamelijk uit detritus bestaat. Indien dit niet het geval is dan moet het PP worden opgesplitst in geadsorbeerd anorganisch P en particulier P. Deze opsplitsing is niet doorgevoerd voor het model EUTROF1A, maar wel voor de modellen EUTROF1 en EUTROF2. In het geval dat het particulier P niet of nauwelijks uit detritus bestaat, kan men beter de laatstgenoemde modellen gebruiken.

De vergelijking voor het opgeloste fosfaat wordt weergegeven door:

$$[15] \quad \frac{dDP}{dt} = +k_{\min} \theta_{\min}^{(T-20)} PP - \mu_{\max} F_T F_N F_L a_{PC} A + \frac{P_{\text{flux}}}{z}$$

Opgelost anorganisch fosfaat wordt gevormd bij de mineralisatie van PP en opgenomen door de algen. Evenals voor ammonium kan door de gebruiker een naleveringsflux vanuit het sediment worden opgegeven.

7.3 Benodigde invoer

Hier wordt slechts de invoer met betrekking tot de kwaliteit beschreven. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging, wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding (STOWA, 1998).

Algemeen geldt dat ten behoeve van een waterkwaliteitssimulatie, de volgende invoer moet worden opgegeven:

- Initiële condities
- Randvoorwaarden inclusief puntlozingen
- Parameters
- Externe variabelen (inclusief de dispersie)

Tabel 7.1

Benodigde invoer model EUTROFIA

Type	Naam	Bron	Typische waarden en dimensies
Initiële condities	A Algenbiomassa	Meting,	g C.m ⁻³
	DP Orto-P	schatting	g P.m ⁻³
	PP Particulair P	inrekenen	g P.m ⁻³
	NORG Organisch Stikstof		g N.m ⁻³
	NH ₄ Ammonium		g N.m ⁻³
	NO ₃ Nitraat		g N.m ⁻³
Randvoorwaarden	Concentratie of belasting op systeemgrenzen en van puntlozingen voor:	Meting, schatting	
	A Algenbiomassa		g C.m ⁻³
	DP Orto-P		g P.m ⁻³
	PP Particulair P		g P.m ⁻³
	NORG Organisch Stikstof		g N.m ⁻³
	NH ₄ Ammonium		g N.m ⁻³
Parameters	μ _{max} max. Groeisnelheid bij 20°C	literatuur	zie tabel 7.2
	α licht efficiëntie (Smith)	literatuur	0.02-0.05
	I _{opt} optimale intensiteit (Steele)	literatuur	zie tabel 7.2
	P _{lopt} optie lichtlimitatiefactor = 1 SMITH (vergelijking 4) = 2 STEELE (vergelijking 8)	keuze	
	a _{CA} chlorofyl koolstof verhouding	literatuur	zie tabel 7.2
	k _{loss} snelheidsconstante algenverlies	literatuur	zie tabel 7.2
	k _{min} snelheidsconstante mineralisatie	literatuur	0.03-0.14 dag ⁻¹
	k _{nit} snelheidsconstante nitrificatie	literatuur	0.04-0.16 dag ⁻¹
	k _{den} snelheidsconstante denitrificatie	literatuur	0.02-0.03 dag ⁻¹
	K _P Monod constante fosfaat	literatuur	zie tabel 7.2
	K _N Monod constante stikstof	literatuur	zie tabel 7.2
	ε ₀ achtergrondextinctie	meting	2·10 ⁻¹
	ε _{alg} specifieke extinctie algen	literatuur	0.015-0.021 m ⁻¹
	θ _{ga} temperatuurcoëfficiënt algengroei	literatuur	zie tabel 7.2
	θ _{min} temperatuurcoëfficiënt mineralisatie	literatuur	1.020-1.080
	θ _{nit} temperatuurcoëfficiënt nitrificatie	literatuur	1.080
	θ _{den} temperatuurcoëfficiënt denitrificatie	literatuur	1.045
	v _{so} sedimentatiesnelheid organische stof	literatuur	0.5-1.5 m.dag ⁻¹
	a _{nc} stikstof/koolstof verhouding	literatuur	zie tabel 7.3
	a _{pc} fosfor/koolstof verhouding	literatuur	zie tabel 7.3
Externe variabelen	D dispersieconstante	literatuur	m ² .s ⁻¹
	I _{om} dagsom instraling	hoofdstuk 1	200-2500 J.cm ⁻²
	L daglengte	meting/KNMI	6-16 uur
	T temperatuur	literatuur	graad C
	Nflux naleveringsflux stikstof	meting	N.m ⁻² .jaar ⁻¹
	Pflux naleveringsflux fosfaat	literatuur	0-10 g P.m ⁻² .jaar ⁻¹
Flow variabelen	z diepte	DUFLOW waterbeweging	m

7.3.1 Initiële condities

Op elke knoop in het netwerk moet de concentratie van alle toestandsvariabelen op het tijdstip van aanvang van de simulatie ($t=0$) worden gegeven. In sommige gevallen kan op basis van gemeten waarden een schatting van de initiële condities worden verkregen. Echter met name in complexe netwerken, waar grote ruimtelijke verschillen in concentratie mogen worden verwacht, is het vaak niet eenvoudig om overal in het netwerk een verantwoorde keuze voor de initiële condities te maken. In dat geval kan men een schatting verkrijgen van de ruimtelijke verdeling van een stof in het systeem, door een aantal inleidende berekeningen uit te voeren, waarbij men een eerste ruwe schatting van de initiële condities gebruikt. Als zich dan een min of meer stationaire situatie heeft ingesteld, gebruikt men de zo berekende concentratieverdeling in het systeem als schatting voor de initiële condities van de eigenlijke simulatie. Het gebruik van het commando 'new initial conditions', in de scenario manager, is hierbij handig.

Men dient er rekening mee te houden, dat met name in systemen met een lange verblijftijd een foutieve keuze van de initiële condities lang kan doorwerken in de simulatie. In het model voor een conservatieve stof (zie hoofdstuk 1) wordt hier nader op ingegaan. Voor een conservatieve stof geldt echter, dat alleen het transport bepalend is voor de insteltijd. Voor een model als EUTROFIA zijn ook de processen van belang en wordt de insteltijd feitelijk bepaald door het langzaamste proces, waardoor een verantwoorde keuze van de initiële condities hier van nog groter belang is.

7.3.2 Randvoorwaarden

Op de geografische randen moet de toestand van het systeem worden opgegeven. Daarnaast worden in DUFLOW ook alle puntlozingen als randvoorwaarden behandeld. Voor elke debiet- of peilrand in het waterbewegingsmodel moet een randvoorwaarde voor de kwaliteit worden ingevoerd. Deze weerspiegelt de kwaliteit van het water dat het netwerk binnenkomt of dat op het netwerk wordt geloosd. Voor elke gedefinieerde toestandsvariabele moet daarom een randvoorwaarde worden ingevoerd. Zij kunnen zowel als functie van de tijd en als constante waarde worden opgegeven.

De algenbiomassa wordt in het model uitgedrukt in mg C.l^{-1} . Dit betekent dat de concentratie op de randen van het systeem en in lozingen ook in deze eenheid moet worden uitgedrukt. In de praktijk wordt de biomassa meestal uitgedrukt in Chl-a. Omrekening kan geschieden door vermenigvuldiging met een vaste koolstof/ chlorofyl verhouding (a_{CA}). Overigens is de algenbiomassa voor veel puntlozingen verwaarloosbaar, zodat een nulwaarde voor de randvoorwaarde volstaat.

Indien op de rand- en lozingsgehalten van zowel P-tot als orto-P bekend zijn, dan kan het particulier P-gehalte (PP) worden berekend uit het verschil van deze twee. Indien deze beide gehalten niet bekend zijn, moet de verdeling over opgelost en particulier P geschat worden.

7.3.3 Parameters

Zelfs dit vereenvoudigde model bevat al 20 parameters, waaraan allemaal een waarde moet worden toegekend. Voor het verkrijgen van een schatting van deze waarde is men aangewezen op de literatuur. Sommige parameters zijn ook experimenteel vast te stellen zijn.

ALGENGROEI

Met de variabele PI_{opt} wordt gekozen welke lichtlimitatiefunctie gebruikt wordt. In principe voldoet onder Nederlandse condities meestal de vergelijking volgens Smith. Dat wil zeggen dat geen rekening wordt gehouden met het optreden van inhibitie bij hoge lichtintensiteiten. Echter in sommige gevallen, bijvoorbeeld in ondiepe of heldere systemen, kan inhibitie wel een rol van betekenis spelen. In dat geval verdient het gebruik van vergelijking 8 de voorkeur. Hieronder volgt een overzicht van een aantal typische waarden voor de belangrijkste parameters in de algenbalansvergelijking.

Tabel 7.2 Karakteristieke waarden van de parameters in de algenbalans-vergelijking voor een aantal algengroepen.

Soort/groep	μ_{max} dag ⁻¹	I_{opt} W.m ⁻²	k_{loss} dag ⁻¹	K_P mgP.l ⁻¹	K_N mgN.l ⁻¹	θ_{ga} (-)	a_{CA} μgChl.mgC ⁻¹
Algemeen	1.0-3.0		0.05-0.3	0.004-0.08	0.01-0.40	1.066	17
Diatomeën	1.6-2.5	88-100				-	9-53
Groen Algen	1.6-2.8	88-100				-	21-48
Cyanobacteriën	0.3-2.0	44-50				-	11-27

Uit de tabel blijkt, dat de verhouding chlorofyl/koolstof sterk kan variëren tussen de verschillende soorten algen. Verschillen binnen een algensoort ontstaan door de mogelijkheid tot adaptie aan de lichtomstandigheden.

STOECHIOMETRIE

Op basis van een "gemiddelde" samenstelling van een alg (en van organische stof) ($C_{106}H_{179}N_{16}O_{46}P$) kan men afleiden, dat de verhoudingsgetallen a_{NC} en a_{PC} respectievelijk gelijk zijn aan 0.176 mg N/mgC en 0.024 mg P/mgC. Het is echter bekend, dat de samenstelling van zowel het algenmateriaal, als de organische stof erg variabel is. Zo kunnen algen bijvoorbeeld interne fosfaatreserves aanleggen, waardoor ongunstige omstandigheden makkelijker worden doorstaan. In tabel 7.3 zijn een aantal waarden vermeld voor diverse algengroepen.

Tabel 7.3 Stoechiometrische verhoudingen voor een aantal algengroepen

Soort/groep	a_{PC}	a_{NC}
Groen Algen	0.016-0.040	0.09-0.16
Cyanobacteriën	0.009-0.014	0.11-0.15

EXTINCTIE EN CHLOROFYL

De achtergrondextinctie varieert van ca. 1.0-3.0 per dag en wordt bepaald door de hoeveelheid opgeloste organische stof en van de concentratie zwevende stof (zie hoofdstuk 6, Het lichtklimaat onder water). De specifieke extinctie van de algen varieert tussen de 0.015-0.021 m².mg Chl-a⁻¹. Een gemiddelde waarde van 0.016 wordt vaak gebruikt.

7.3.4 Externe variabelen

Externe variabelen zoals de dagsom globale straling, de daglengte, temperatuur en de nutriëntfluxen zijn in DUFLOW in principe variabelen die in de praktijk in tijd of plaats kunnen variëren. Ook de dispersiecoëfficiënt wordt in DUFLOW als externe variabele opgegeven. Voor typische waarden van de dispersieconstante wordt verwezen naar hoofdstuk 1, Conservatieve stof.

De dagsomstraling wordt op de meeste stations van het KNMI geregistreerd. Het gaat hierom de dagsom globale straling, hetgeen een groter golflengtegebied omvat dan het voor de fotosynthese interessante deel van de straling (PAR ca. 400-700 nm). Het aandeel van de PAR bedraagt ca. 50 % van de globale straling. PAR kan ook worden gemeten met speciale lichtcellen, die alleen registreren in het golflengtegebied van 400-700 nm. Een goede benadering van de daglengte kan worden verkregen uit het theoretische maximaal aantal uren zonneshij. Deze zijn onder meer getabelleerd in het Cultuurtechnische Vademecum (1988).

Voor de watertemperatuur kunnen uiteraard gemeten waarden worden ingevoerd. Ook kan de temperatuur worden voorspeld met het model TEMP (zie hoofdstuk 12, Watertemperatuur). Daar het model EUTROF1A echter over korte perioden toepasbaar is, kan in de meeste gevallen worden volstaan met het gebruik van een constante waarde.

De naleveringsfluxen van fosfaat en stikstof lopen sterk uiteen en zijn erg afhankelijk van het systeem. Volstaan wordt met de vermelding van een aantal karakteristieke waarden voor het Veluwemeer.

Tabel 7.4 Naleveringsfluxen van het Veluwemeersysteem

Systeem	P _{flux} (mg P.m ⁻² .dag ⁻¹)	N _{flux} (mg N.m ⁻² .dag ⁻¹)
Veluwemeer	zomer	winter
zand	1.7	0.3
zavel	3.8	0.5
klei	10.4	1.4

7.4 Uitvoer

Naast de in het model gedefinieerde toestandsvariabelen kunnen een aantal afgeleide grootheden worden uitgevoerd. Deze zijn als functie gedefinieerd en kunnen als uitvoervariabele worden geselecteerd. Het gaat om de volgende grootheden:

$$Kj-N = N_{org} + NH_4$$

$$N-tot = N_{org} + a_{NCA} + NH_4 + NO_3$$

$$P-tot = PP + DP + a_{PCA}$$

$$Chl-a = a_{CA}$$

Naast bovengenoemde grootheden, zijn nog een groot aantal tussenresultaten van functies uit te voeren. Deze kunnen van belang zijn bij de nadere analyse van de uitkomsten. Voorbeelden van deze factoren zijn onder andere de licht- en de nutriëntlimitatiefactoren F_L en F_N , de actuele groeisnelheid van de algen G_A en de totale extinctie ϵ_{tot} .

7.5 Voorbeeld

Als voorbeeld van een toepassing is gekozen voor een doorspoeling van een stadssingel, waarbij vanwege de modelbeperkingen alleen het korte termijn effect kan worden bekeken. Het model maakt een voorspelling van het totaal P gehalte en de algenbiomassa in een stadssingel. Het model is toegepast op hetzelfde systeem als in hoofdstuk 2, waarin het model een stof beschrijft dat onderhevig is aan afbraak.

7.5.1 Situatieschets

Voor de geometrie van het systeem wordt verwezen naar figuur 2.1 in hoofdstuk 2. In dit voorbeeld wordt het systeem in de uitgangssituatie doorspoeld met een debiet van $0.05 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Het water wordt ingevoerd op knoop 1. De kwaliteit van het inlaatwater wordt weergegeven in onderstaande tabel. Naast de aanvoer van nutriënten met het inlaatwater wordt de singel ook belast door het effluent van een aantal regenwaterriolen. Het totale zomer gemiddelde van dit effluent wordt geschat op ca. $7 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{jaar}^{-1}$. Deze belasting is opgevat als een diffuse bron en is gelijkmatig verspreid over de knopen 2-10. Verder is aangenomen dat er een aanzienlijke nalevering van P vanuit het sediment plaatsvindt. Allereerst is de huidige situatie met het model onderzocht en vervolgens is nagegaan wat het effect is van verdubbeling van het doorstroomdebiet. Daarbij ligt de nadruk van het model op de fosfaatconcentratie en de algenbiomassa.

Tabel 7.5 Concentraties aan nutriënten en algenbiomassa in het doorspoelwater

A (mgC.l ⁻¹)	DP (mg P.l ⁻¹)	PP (mgP.l ⁻¹)	NH ₄ (mg N.l ⁻¹)	N _{ORG} (mgN.l ⁻¹)	NO ₃ (mgN.l ⁻¹)
0.5	0.01	0.07	1.0	1.5	2.0

7.5.2 DUFLOW invoer

CALCULATION SETTINGS

Er wordt gerekend met een tijdstap voor de waterbeweging van 30 min. De tijdstap voor de simulatie van de kwaliteit is 60 min. De totale duur van de simulatie is 1 maand. Het uitvoerinterval is 6 uur en voor elke sectie worden de resultaten weergegeven. Alle kwaliteitsvariabelen worden uitgevoerd, inclusief alle functies, die in dit model zijn gedefinieerd.

HET NETWERK

Deze gegevens zijn niet gewijzigd ten opzichte van het netwerk, zoals gedefinieerd in hoofdstuk 2.4, voorbeeld stadswater.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor de waterbeweging zijn evenals het voorbeeld in hoofdstuk twee met 'new initial conditions' vastgesteld. De uitgangssituatie voor 'new initial conditions' is een doorstroomdebiet van $0.05 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$.

De initiële concentraties van alle toestandsvariabelen voor de kwaliteit zijn eveneens met 'new initial conditions' vastgesteld. De stationaire concentratieverdeling in het systeem aan het eind van de simulatie is als initiële conditie voor de eigenlijke berekening gebruikt.

RANDVOORWAARDEN

Op knoop 1 is om de verversing in het systeem te simuleren, een constant debiet als randvoorwaarde opgegeven. In de uitgangssituatie bedraagt de waarde hiervan $0.05 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Als alternatief is een situatie doorgerekend met een debietrand op knoop 1 van $0.1 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Benedenstreams is een constant peil als randvoorwaarde opgelegd.

De kwaliteit van het doorstroom water, zoals weergegeven in tabel 7.5 is op knoop 1 als randvoorwaarde opgegeven. Daarnaast is vanwege de diffuse fosfaatbelasting een constante belasting op de knopen 2-10 van zowel DP als PP opgegeven. De totale belasting van $7 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{jaar}^{-1}$ is daarmee evenredig verdeeld. Verder is de aanname gemaakt, dat het totaal P voor 50 % uit DP bestaat.

EXTERNE VARIABELEN

Voor de naleveringsflux van P is een waarde van $10 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{jaar}^{-1}$ gebruikt. Dit is een hoge waarde, die verwacht mag worden in een systeem met een dikke laag organisch slib. Daar de nadruk lag op de simulatie van de fosfaathuishouding is geen waarde voor de naleveringsflux van stikstof opgegeven. Er is uitgegaan van typische zomercondities, een daglengte van 16 uur en een watertemperatuur van 20°C . Voor de instraling is een waarde van $1000 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$ gebruikt. De totale dagsom globale straling voor een typische zomerdag is $2000\text{-}2500 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$. Ongeveer 50 % hiervan valt in het PAR gebied en is dus beschikbaar voor fotosynthese.

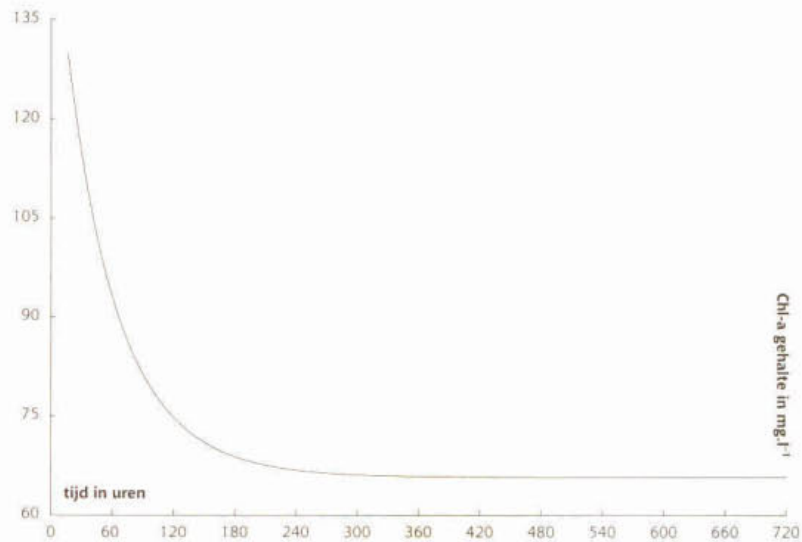
PARAMETERS

De parameters in de stikstofhuishouding zijn aan nul gelijkgesteld. Voor de algengroei zijn parameterwaarden gekozen, die karakteristiek zijn voor een alg in een eutroof systeem.

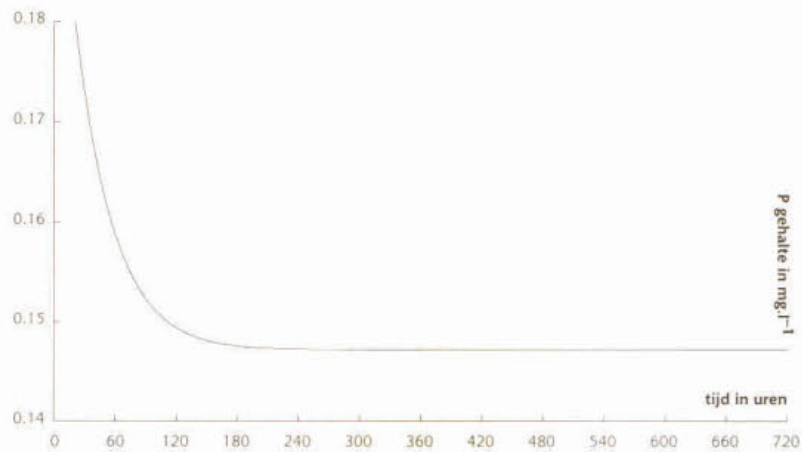
7.5.3 Resultaten

De resultaten worden weergegeven in figuren 7.2 en 7.3. Gesimuleerd is het effect van verdubbeling van het inlaatdebiet. In de uitgangssituatie is het Chl-a gehalte in de 5 bovenstroomse secties nagenoeg gelijk aan 150 mg.l^{-1} . Het totaal P gehalte is ca. 0.20 mg.l^{-1} . Verdubbeling van het doorstroomdebiet leidt tot een verlaging van beide gehalten tot respectievelijk $75 \text{ mg Chl-a.l}^{-1}$ en 0.15 mgP.l^{-1} .

Figuur 7.2 Verloop van het gehalte aan Chl-a na verdubbeling van het doorspoeldebiet*



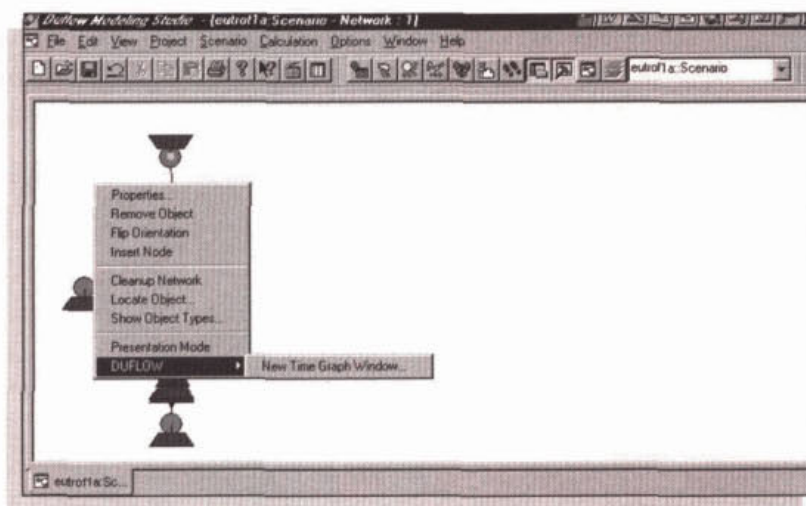
Figuur 7.3 Verloop van het totaal P gehalte na verdubbeling van het doorspoeldebiet*



* De afname van de Chl-a en totaal P gehalten verloopt in alle secties zodanig, dat de lijnen in de figuren vrijwel samenvallen. In beide grafieken is sectie 2 weergegeven.

Het is mogelijk om zonder kennis van het netwerk snel een beeld te krijgen van het verloop van het gehalte van Chl-a in een bepaalde sectie. Hiertoe kan de betreffende sectie worden aangeklikt. Door met de rechtermuisknop te klikken verschijnt de optie 'DUFLOW' onder de optie 'presentation mode'. Via deze optie verschijnt de 'new time graph' dialoog, waarin de betreffende sectie reeds geselecteerd is. In figuur 7.4 is deze dialoog zichtbaar.

Figuur 7.4 Maken van een grafiek van één bepaalde sectie



Literatuur

Brown, G.L. et al., 1988. WASP4 a Hydrodynamic and Water Quality Model. Environmental Research Laboratory and Office of Research and Development, Athens, Georgia

Cultuurtechnische Vereniging, 1988, Cultuurtechnisch Vademecum, Utrecht

Smith, E.L., 1936. Photosynthesis in relation to Light and Carbon Dioxide, Proc. Natl. Acad. Sci. 22: 504-511

Steele, J.H., 1962. Environmental Control of Photosynthesis in the Sea, Limnol. Oceanogr. 7: 137-150

STOWA 1998, DufLOW for Windows, Stowarapport 98-19.

Straten, G. van, 1986. Identification, Uncertainty Assessment and Prediction in Lake Eutrophication, proefschrift, Enschede

■ Bijlage 1

Procesbeschrijvingen EUTROF1A (EUTROF1A.MOD)

```

/*
/* MODEL EUTROF1A
/* Eenvoudig model voor N/P huishouding en algengroei
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW
/*
/* Landbouwniversiteit Wageningen
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie
/* Postbus 8080
/* 6700 DD Wageningen
/*
water A [2.00] mg C/l :algenconcentratie
water DP [0.01] mg P/l :orto-P concentratie
water NH4 [0.10] mg N/l :ammonium-N concentratie
water NO3 [0.20] mg N/l :nitraat-N concentratie
water NORG [0.20] mg N/l :organisch-N concentratie
water PP [0.10] mg P/l :particulair-P concentratie

parm Aca [30] ug Chl/mg C :chlorofyl/koolstof verhouding
parm alfa [0.02] m2/W :lichtefficiëntie
parm anc [0.176] mg N/mg C :stikstof/koolstof verhouding
parm apc [0.024] mg P/mg C :fosfaat/koolstof verhouding
parm E0 [2.0] 1/m :achtergrondextinctie
parm Ealg [0.016] m2/mg Chl :specifieke extinctie chlorofyl
parm lopt [40.0] W/m2 :optimale lichtintensiteit
parm Kden [0.05] 1/dag :snelheidsconstante denitrificatie
parm Kloss [0.1] 1/dag :snelheidsconstante algenverliezen
parm Kmin [0.1] 1/dag :snelheidsconstante mineralisatie
parm Kn [0.010] mg/l :monod constante N
parm Knit [0.2] 1/dag :snelheidsconstante nitrificatie
parm Kp [0.005] mg/l :monod constante P
parm Piopt [1] - :keuze lichtlimitatie (1 = smith, 2 = steele)
parm Tden [1.06] - :temperatuurcoëfficiënt denitrificatie
parm Tga [1.04] - :temperatuurcoëfficiënt algengroei
parm Tmin [1.04] - :temperatuurcoëfficiënt mineralisatie
parm Tnit [1.06] - :temperatuurcoëfficiënt nitrificatie
parm Umax [1.00] 1/dag :maximale groeisnelheid
parm VsO [1.0] m/dag :sedimentatiesnelheid organische stof

xt Isom [0.0] J/cm2 :dagsom instraling
xt L [12] uur :daglengte
xt Nflux [0.0] g/m2,dag :naleveringsflux stikstof
xt Pflux [0.0] g/m2,dag :naleveringsflux fosfaat
xt T [20] oC :temperatuur

flow Z [1.0] m :waterdiepte
{
FT = Tga ^ (T-20);
fl = MIN(DP/(DP + KP), NH4/(NH4 + KN));
IOmax = 2*Isom*10000/(L*3600);
Chla = aca*A;
Etot = E0 + EALG*Chla;

IF (Piopt = 1)
{
H1 = (1 + (alfa*IOmax) ^ 2) ^ 0.5;
FL = L*(LN(alfa*IOmax + H1 + (1-H1)/(alfa*IOmax)))/(24*Etot*Z);
}
IF (Piopt = 2)
{
f = (L/24);
alfa1 = alfa*exp(-1*Etot*Z);
}

```

```

FL=2.718*f*(exp(-1*alfa1)- exp(-1*alfa))/(Etot*Z);
}

GA=Umax*FT*fI*FL;
K1(A)=GA-Kloss;

KminT=Kmin*Tmin ^ (T-20);
K1(NORG)=-KminT-VsO/Z;
K0(NORG)=Kloss*anc*A;

KnitT=Knit*Tnit ^ (T-20);
K1(NH4)=-KnitT;
K0(NH4)=KminT*NORG-GA*anc*A+Nflux/Z;

KdenT=Kden*Tden ^ (T-20);
K1(NO3)=-KdenT;
K0(NO3)=KnitT*NH4;

K1(PP)=-KminT-VsO/Z;
K0(PP)=Kloss*apc*A;

K1(DP)=0;
K0(DP)=KminT*PP-GA*apc*A+Pflux/Z;

KJN=NORG+NH4+anc*A;
Ntot=KJN+NO3;
Ptot=PP+DP+apc*A;
}

```


PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

EUTROF2A

augustus 1997

hoofdstuk

8

R.H. Aalderink

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

8

Inhoudsopgave

8.1 EUTROF2A 5

8.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen 5

8.2 Procesbeschrijvingen 6

8.2.1 Beschrijving sediment water uitwisseling 6

8.2.2 Beschrijving algengroei 9

8.2.3 Beschrijving fosfaathuishouding 12

8.2.4 Beschrijving stikstofhuishouding 15

8.3 Benodigde invoer 18

8.3.1 Initiële condities 18

8.3.2 Randvoorwaarden 18

8.3.3 Parameters 21

8.3.4 Externe variabelen 23

8.4 Uitvoer 23

8.5 Voorbeeld 25

8.5.1 Situatieschets 25

8.5.2 DUFLOW invoer 26

8.5.3 Resultaten 28

Literatuur 31

Bijlagen

Bijlage 1 *Procesbeschrijvingen EUTROF2A (EUTROF2A.MOD)* 32

8.1 EUTROF2A

De procesbeschrijvingen in dit model zijn afgeleid van het model EUTROF2. Op de volgende drie punten is het model ten opzichte van EUTROF2 gewijzigd, dit zijn:

[1] De temperatuurafhankelijkheid voor algen, deze is in EUTROF2A, anders dan in EUTROF2, niet beschreven met een optimumcurve. De afhankelijkheid van de temperatuur is op dezelfde wijze vereenvoudigd als in EUTROF1A.

[2] De zuurstofhuishouding is niet beschreven. Dit betekent dat, zowel voor zuurstof, als voor BZV geen massabalansen worden berekend.

[3] Tenslotte is de opnamekinetiek van ammonium gewijzigd door weglating van een ingewikkelde vergelijking voor de preferentie van ammonium of nitraat. In dit model geeft een in te voeren constante de preferentie voor het nutriënt weer.

Het belangrijkste onderscheid met het model EUTROF1A, is dat in EUTROF2A de uitwisseling tussen sediment en water dynamisch wordt beschreven. Dit maakt EUTROF2A een stuk minder inzichtelijk op de vlakken van simulatieanalyse en gevoeligheidsanalyse. Met de toename van complexiteit neemt immers het aantal benodigde gegevens toe. Vandaar dat een groot aantal gegevens moet worden verzameld om het model te kunnen toepassen. In EUTROF1A wordt de sediment-water interactie als een naleveringsflux opgegeven.

8.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen

EUTROF2A beschrijft de groei van maximaal drie algensoorten. Door keuze van karakteristieke parameters kunnen de vergelijkingen verschillende groepen algen *simuleren*, waardoor het model op eenvoudige wijze de successie in de soortensamenstelling beschrijft. De vergelijkingen voor de groei van algen in dit model, zijn dezelfde als de vergelijking in EUTROF1A. De groeivergelijkingen geven slechts een simpele weergave van de werkelijkheid. Zo is bekend, dat algen zich aanpassen aan een gewijzigde lichtcondities, waardoor de C/Chl-a verhouding kan veranderen. Dit soort processen worden niet in dit model meegenomen.

In dit model is ook geen silicium-balans opgenomen. Met name de groeisnelheden van de diatomeënpopulatie is gevoelig voor siliciumtekorten. Bedacht moet worden, dat in situaties waarin silicium limiterend is voor bepaalde soorten de biomassa in de modelsituatie wordt overschat.

Daar in dit model de uitwisseling tussen sediment en de bovenstaande waterkolom dynamische wordt beschreven, is het model in principe geschikt voor het uitvoeren van simulaties over langere tijdschalen. Het model kan gebruikt worden voor de voorspelling van de accumulatie van nutriënten in het sediment. Een andere typische toepassing is de berekening van de naijende interne belasting na reductie van de externe belasting van een systeem.

8.2 Procesbeschrijvingen

8.2.1 Beschrijving van de sediment water uitwisseling

Voor de beschrijving van de uitwisseling tussen het sediment en de waterkolom wordt gebruikgemaakt van het concept van een actieve sedimenttoplaag met een constante porositeit en dikte. Dit houdt in dat deze toplaag door zijn constante porositeit en dikte zich continu verplaatst in de verticaal, waardoor de oude toplaag vrijkomt of begraven wordt. Bovendien zijn de stoffen, die zich in de toplaag bevinden, onderhevig aan allerlei fysische en biologische processen waaronder transport van en naar het bovenstaande water en omzettingsprocessen als mineralisatie en nitrificatie.

Naast de sedimenttoplaag is ook een sedimentonderlaag gedefinieerd. Er wordt verondersteld, dat in deze laag de concentraties constant blijven. Hier vinden dus geen processen plaats. Wel wordt in het model de uitwisseling van materiaal tussen de top- en onderlaag beschreven. Op deze wijze worden de uitwisselingsfluxen in EUTROF2A dynamisch berekend.

Figuur 8.1 (blz. 9) geeft een schematisch overzicht van het gehanteerde concept en toont welke fluxen van belang zijn voor de beschrijving van de sediment water uitwisseling. Onderscheid wordt gemaakt tussen verbindingen die opgelost zijn en stoffen die geassocieerd zijn aan particulier materiaal. Voor opgeloste stoffen is diffusie het belangrijkste transportmechanisme. Voor particulier gebonden stoffen geldt, dat de uitwisseling vooral wordt bepaald door sedimentatie en resuspensie.

Naast bovengenoemde transportmechanismen, volgt uit het gehanteerde concept nog een aantal fluxen, waarmee de begraving van stoffen en het insluiten en het vrijkomen van stof in het poriewater wordt beschreven. De volgende vijf fluxen worden onderscheiden:

I. DIFFUSIEFLUX TUSSEN WATER EN SEDIMENTTOPLAAG

Er wordt verondersteld, dat alleen het opgeloste stof aan diffusie onderhevig is. Voor de flux tussen de sedimenttoplaag en de bovenstaande waterkolom geldt algemeen:

$$[1] \quad F_{XD} = \frac{E_z}{0,5 \cdot DZ} \cdot (D_{XB} - D_{XW})$$

Waarin:

- F_{DX} de flux ten gevolge van diffusie ($\text{g X} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$)
- E_z de diffusiecoëfficiënt bij het grensvlak water-sedimenttoplaag ($\text{m}^2 \cdot \text{dag}^{-1}$)
- DZ de dikte van de toplaag (m)
- D_{XB} de concentratie in het poriewater ($\text{g X} \cdot \text{m}^{-3}$)
- D_{XW} de concentratie opgeloste stof in de waterkolom ($\text{g X} \cdot \text{m}^{-3}$)

Het verschil tussen de concentratie in het poriewater en het bovenstaande water is de drijvende kracht voor diffusie. De opgeloste stof wordt berekend uit:

$$[2] \quad \begin{aligned} D_{XW} &= F_{dXW} \cdot T_{XW} \\ D_{XB} &= F_{dXB} \cdot T_{XB} \end{aligned}$$

Waarin: f_{dXW} en f_{dXB} de fractie opgeloste stof X in waterkolom en sediment (-)
 T_{XW} en T_{XB} het totaal stof X gehalte in waterkolom en sediment ($g X \cdot m^{-3}$)
 Daar in het model de concentraties in het sediment worden betrokken op het natte sedimentvolume dienen deze te worden gecorrigeerd voor de porositeit. Zo geldt bijvoorbeeld voor de nitraatconcentratie in het poriewater dat:

$$[3] \quad NO_{3,I} = \frac{NO_{3,B}}{POR}$$

Waarin: $NO_{3,I}$ de nitraatconcentratie in het interstitieel water ($g N \cdot m^{-3}$)
 $NO_{3,B}$ de nitraatconcentratie in de bodem ($g N \cdot m^{-3}$)
 POR de porositeit (-)

Eigenlijk is vergelijking 3 een benadering van de concentratiegradiënt aan het grensvlak tussen water en sediment, waarbij dC/dz wordt benaderd door het concentratieverschil gedeeld door de helft van de dikte van de actieve toplaag. Voor de diffusieconstante E_z geldt, dat deze in ondiep water vaak groter is dan de moleculaire diffusie. Zo ontstaan door het optreden van windgeïnduceerde golven drukgradiënten in het sediment, die het transport over het grensvlak versnellen. Deze versnelde diffusie kan worden beschreven met een zogenaamde mechanische diffusieconstante. Deze neemt exponentieel af met de diepte tot het sediment. Portielje (1992) geeft hiervoor de volgende benadering:

$$[4] \quad E_{z(h)} = 1,0 \cdot 10^{-5} + E_{z,0} \cdot e^{(-50h)}$$

Waarin: $E_{z(h)}$ de waarde van E als functie van de afstand tot het grensvlak ($m^2 \cdot dag^{-1}$)
 h de afstand tot het water-sediment grensvlak (m)
 $E_{z,0}$ de waarde van E_z aan het grensvlak water-sediment ($m^2 \cdot dag^{-1}$)

2. DIFFUSIEFLUX TUSSEN SEDIMENTTOP- EN ONDERLAAG

Voor opgeloste verbindingen geldt dat ook diffusie het voornaamste transportproces is over het grensvlak tussen de top- en onderlaag van het sediment. Er geldt:

$$[5] \quad F_{XDL} = \frac{E_{z(h)}}{0,5 \cdot DZ} \cdot (D_{XB} - D_{XLB})$$

Waarin D_{XLB} de vaste concentratie in de sedimentonderlaag voorstelt ($g X \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$).

3. SEDIMENTATIEFLUX

De particulaire fractie van een stof is onderhevig aan sedimentatie. De sedimentatieflux van een stof wordt direct gerelateerd aan de sedimentatieflux van zwevende stof.

Er geldt:

$$[5] \quad F_{XPS} = F_{sed} \cdot P_{XW} + V_s \cdot POR \cdot D_{XW}$$

Waarin: F_{XPS} de flux ten gevolge van sedimentatie ($g X \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$)
 F_{sed} de sedimentatieflux van zwevende stof ($g SS \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$)
 P_{XW} het gehalte stof in de zwevende stof ($g X \cdot g SS^{-1}$)

V_s de advectieve transportsnelheid (zie vergelijking 9) ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)
 D_{XW} het opgeloste deel van de stof ($\text{g X} \cdot \text{m}^{-3}$)

De eerste term in vergelijking 6 beschrijft de sedimentatie van particulier gebonden materiaal. Het gehalte P_{XW} wordt voor elke stof berekend met behulp van:

$$[7] \quad P_{XW} = \frac{(1 - f_{dXW}) \cdot T_{XW}}{SS_W}$$

De sedimentatieflux voor zwevende stof F_{sed} is gelijk aan:

$$[8] \quad F_{sed} = V_{SS} \cdot SS_W$$

Waarin: V_{SS} de sedimentatiesnelheid van zwevende stof ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)
 SS_W het gehalte zwevende stof ($\text{g SS} \cdot \text{m}^{-3}$)

De tweede term in vergelijking 6 beschrijft de insluiting van opgeloste stof bij de vorming van nieuw sediment tijdens sedimentatie. De vorming van sediment door sedimentatie gebeurt met een snelheid V_s . Dit is feitelijk de snelheid waarmee het grensvlak water-sediment verschuift ten gevolge van de aangroei van het sediment. Deze snelheid wordt gegeven door:

$$[9] \quad V_s = \frac{F_{sed}}{\rho \cdot (1 - \text{POR}) \cdot 1000}$$

De dichtheid (ρ in $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) van het sediment wordt berekend uit de dichtheid van anorganische en organische stof en de fractie organische stof in het sediment. Waarbij er overigens van wordt uitgegaan, dat de samenstelling gelijk blijft.

4. RESUSPENSIEFLUX

De resuspensieflux van een stof is, analoog aan de sedimentatieflux, direct gerelateerd aan de resuspensieflux van zwevend stof. Er geldt:

$$[10] \quad F_{XPR} = F_{res} \cdot P_{XB} + V_r \cdot \text{POR} \cdot D_{XB}$$

Ook nu valt de totale flux uiteen in een tweetal termen. De eerste beschrijft de opwerking van particulier gebonden stof en in de tweede term wordt het vrijkomen van opgeloste stof tijdens resuspensie berekend.

P_{XB} stelt in vergelijking 10 de particuliere stof voor, waaraan een stof is geadsorbeerd. De beschrijving van P_{XB} zelf wordt gegeven door:

$$[11] \quad P_{XB} = \frac{(1 - f_{dXB}) \cdot T_{XB}}{SS_B}$$

In de tweede term van vergelijking 10 is V_r de snelheid waarmee het grensvlak verschuift ten gevolge van resuspensie. Deze snelheid wordt gegeven door:

$$[12] \quad V_r = \frac{F_{res}}{\rho \cdot (1 - \text{POR}) \cdot 1000}$$

De resuspensieflux van zwevende stof wordt niet berekend in het model. Deze dient door de gebruiker te worden opgegeven. Eventueel kan hiervoor gebruik worden gemaakt van de modellen beschreven in de hoofdstukken 4 en 5, respectievelijk getiteld Slibstroom en Slibmeer.

5. BEGRAVINGSFLUX

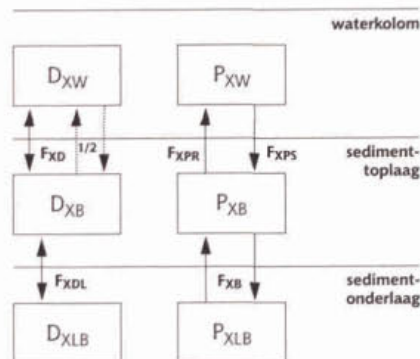
De laatste flux beschrijft de uitwisseling tussen sedimenttop- en onderlaag ten gevolge van het optreden van netto sedimentatie of netto resuspensie. Deze flux is eveneens het gevolg van de verplaatsing van het water-sediment grensvlak. Daar wordt aangenomen, dat de dikte van de actieve toplaag constant is, betekent dit dat indien door aangroei of erosie het grensvlak water-sediment verschuift ook het grensvlak tussen top- onderlaag moet worden verplaatst. Dit geeft aanleiding tot een flux die gelijk is aan:

$$[13] \quad F_{XB} = -V_{sd} \cdot T_{XB} \dots \text{als} \dots V_{sd} < 0 \text{ en}$$

$$F_{XB} = V_{sd} \cdot T_{XBL} \dots \text{als} \dots V_{sd} \geq 0$$

Waarin: V_{sd} de netto verplaatsingsnelheid gelijk aan $V_s - V_r$ (m.dag⁻¹)

Figuur 8.1 Overzicht van de fluxen in uitwisseling tussen sediment en water.



1/2: insluiting en/of vrijkomen van poriewater bij respectievelijk sedimentatie of resuspensie

8.2.2 Beschrijving van algengroei

Het model biedt de mogelijkheid drie soorten algen te beschrijven. De gehanteerde vergelijkingen zijn voor elke soort hetzelfde. Hetgeen betekent dat door verschillende waarden voor de karakteristieke parameters verschillende soorten algen kunnen worden gesimuleerd. De algemene algenbalansvergelijking wordt gegeven door:

$$[14] \quad \frac{dA_{W,i}}{dT} = [Gr_i - Loss_i] \cdot A_{W,i}$$

Waarin: $A_{W,i}$ de biomassa aan alg i ($i = 1$ tot en met 3) ($g \cdot C \cdot m^{-3}$)
 Gr_i de groeisnelheid (dag^{-1})
 $Loss_i$ de totale verliessnelheid (dag^{-1})

De groei van algen wordt gelimiteerd door nutriënten, licht en temperatuur. De beschrijving van de algengroei is een vermenigvuldiging van deze drie limitatiefactoren met de maximale ongelimiteerde groeisnelheid. Er geldt:

$$[15] \quad G_{r,i} = \mu_{\max} \cdot F_{T,i} \cdot F_{N,i} \cdot F_{L,i}$$

Waarin: μ_{\max} de maximale groeisnelheid (dag^{-1})
 $F_{T,i}$ de limitatiefactor voor temperatuur (-)
 $F_{N,i}$ de limitatiefactor voor nutriënten (-)
 $F_{L,i}$ de limitatiefactor voor licht (-)

De limitatie door nutriënten wordt beschreven als:

$$[16] \quad F_{L,i} = \min \left[\frac{\text{DIP}_W}{\text{DIP}_W + K_{p,i}}, \frac{\text{DIN}_W}{\text{DIN}_W + K_{n,i}} \right]$$

Waarin: DIP_W de concentratie opgelost anorganisch fosfaat stof (g P.m^{-3})
 DIN_W de concentratie totaal opgelost anorganisch stikstof [$\text{NO}_3 + \text{NH}_4$] (g N.m^{-3})
 $K_{p,i}, K_{n,i}$ de Monod constanten voor fosfaat en stikstof (g X.m^{-3})

Door het gebruik van vergelijking 16 wordt de reductie van de maximale groei bepaald door de meest limiterende nutriënt.

Lichtlimitatie wordt beschreven met de over de dag en diepte gemiddelde Steele vergelijking. Deze wordt gegeven door:

$$[17] \quad F_{L,i} = \frac{e \cdot f}{\epsilon_{\text{tot}} \cdot Z} [\exp(-\alpha_{1i}) - \exp(-\alpha_{0i})]$$

Waarin:

$$[18] \quad \alpha_{0i} = \frac{I_a}{I_{S,i}}$$

en

$$[19] \quad \alpha_{1i} = \alpha_{0i} \exp(-\epsilon_{\text{tot}} \cdot Z)$$

Hierin is: $I_{S,i}$ de optimale lichtintensiteit (W.m^{-2})
 I_a de over de daglengte gemiddelde lichtintensiteit (W.m^{-2})
 f de fractie van de dag dat het licht is (daglengte/24) (-)
 ϵ_{tot} de totale extinctie coëfficiënt (m^{-1})

Het model is bedoeld voor simulatie over langere tijdschalen, zodat er wordt gerekend met een over de dag gemiddelde licht limitatiefactor. Als gevolg daarvan kan dit model niet de dagelijkse variatie beschrijven.

De totale extinctiecoëfficiënt wordt bepaald door een achtergrond extinctie, en door bijdrage door chlorofyl en zwevende stof (zie ook hoofdstuk 6). Er geldt:

$$[20] \quad \epsilon_{\text{tot}} = \epsilon_0 + \epsilon_{\text{alg}} \cdot \text{Chl-a} + \epsilon_{\text{SS}} \cdot \text{SS}_W$$

Waarin: ϵ_0 de achtergrondextinctie
 ϵ_{alg} de specifieke extinctie van chlorofyl
 ϵ_{SS} de specifiek extinctie van zwevende stof

Algenbiomassa wordt in het model uitgedrukt in $g\ C.m^{-3}$. De concentratie algen kan in het model worden omgerekend naar chlorofyl door vermenigvuldiging met een constante verhouding tussen chlorofyl en koolstof. Voor elke gedefinieerde algensoort kan deze verhouding worden ingevoerd. De chlorofylconcentratie is dan gelijk aan:

$$[21] \quad Chl-a = \sum_{i=1}^3 a_{ChlC,i} \cdot A_{Wi}$$

De temperatuurafhankelijkheid van de groei wordt beschreven als:

$$[22] \quad F_{Ti} = \theta_{ga}^{(T-20)}$$

Waarin: θ_{ga} de temperatuurcoëfficiënt (-)
 T de watertemperatuur ($^{\circ}C$)

In het model worden drie verliestermen geïntroduceerd. De eerste term, respiratie, wordt in deze vergelijking afhankelijk van de temperatuur verondersteld. De tweede term, afsterving, gaat uit van een constante afstervingsnelheid binnen de algenpopulatie. Ten slotte beschrijft de derde term het verlies door sedimentatie; de algen worden immers in de toplaag gemineraliseerd. De totale snelheidsconstante voor het verlies wordt gegeven door:

$$[23] \quad Loss_i = K_{die,i} + k_{res,i} \cdot \theta_{ra,i}^{(T-20)} - \frac{v_{sa,i}}{Z}$$

Waarin: $K_{die,i}$ de afstervingsnelheid (dag^{-1})
 $k_{res,i}$ de respiratiesnelheid (dag^{-1})
 $\theta_{ra,i}$ de respiratie temperatuurcoëfficiënt (-)
 $v_{sa,i}$ de sedimentatiesnelheid van de algen ($m.dag^{-1}$)

Hoewel de sedimentatiesnelheid van algen gering is, kunnen sedimenterende algen toch een belangrijk aandeel hebben in de belasting van het sediment met organische stof en nutriënten. Eenmaal gesedimenteerd worden de algen anaëroob omgezet en komen de aanwezige nutriënten vrij. Daarom wordt ook in het sediment een balans voor algen bijgehouden. Vanwege de koolstof-nutriënten verhouding, die voor de drie onderscheiden soorten gelijk is, kan worden volstaan met een toestandsgrootheid, die de gesedimenteerde algen hoeveelheid beschrijft. Er geldt:

$$[24] \quad \frac{dA_B}{dT} = -\min a_B \cdot A_B$$

met $\min a_B = -K_{daB} \cdot \theta_{daB}^{(T-20)}$

Hierin is: A_B de concentratie algen in het sediment ($\text{g C} \cdot \text{m}^{-3}$)
 K_{daB} de snelheidsconstante voor de mineralisatie van algen (dag^{-1})
 θ_{daB} de temperatuurcoëfficiënt voor de mineralisatie van algen (-)

Door de weergave van vergelijking 24 wordt aangenomen, dat er geen transport is van levende algen van het sediment naar de waterkolom.

De in de algenbalans onderscheiden termen voor groei en verlies zijn als zodanig ook als uitvoervariabelen te op te vragen. Daarnaast wordt ook de som van de drie groei-, verlies- en respiratiesnelheden berekend. Deze grootheden worden in de balansvergelijkingen voor de nutriënten gebruikt. Berekend worden:

$$[25] \quad GrT = \sum_{i=1}^3 Gr_i \cdot A_{W,i}$$

en

$$[26] \quad RespT = \sum_{i=1}^3 K_{die,i} + k_{res,i} \cdot \theta_{ra,i}^{(T-20)}$$

8.2.3 Beschrijving van de fosfaathuishouding

Figuur 8.2 geeft een overzicht van de toestandsvariabelen en processen in de fosfaathuishouding. In het model wordt onderscheid gemaakt tussen organisch (TOP) en anorganisch fosfaat (TIP). Beiden worden onderverdeeld in een opgeloste en particuliere fractie. Er wordt aangenomen, dat de fractie opgelost organisch P (DOP) constant is. Deze verhouding wordt door de gebruiker opgegeven. De verdeling tussen opgelost (DIP) en particulier anorganisch (PIP) fosfaat wordt berekend in het model. Een tweede aanname in het model is, dat de adsorptie- en desorptieprocessen zo snel verlopen, dat wordt aangenomen, dat het evenwicht zich instantaan instelt. In dat geval kan de opgeloste fractie worden berekend met een partiticoëfficiënt. Er geldt:

$$[27] \quad f_{dpW} = \frac{1}{1 + K_{pipW} \cdot SS_W}$$

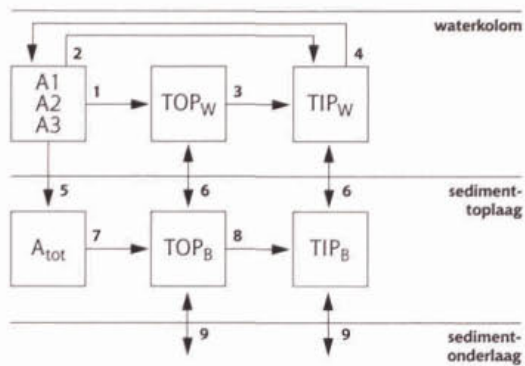
en

$$[28] \quad f_{dpB} = \frac{1}{1 + K_{pipB} \cdot SS_B}$$

Waarin: K_{pipW}, K_{pipB} de partiticoëfficiënt in water en sediment ($\text{m}^{-3} \cdot \text{g SS}^{-1}$)
 SS_W, SS_B het zwevend stofgehalte in water en op het sediment ($\text{g C} \cdot \text{m}^{-3}$)
 f_{dpW}, f_{dpB} de fractie opgelost P (DIP) in water en in sediment (-)

Figuur 8.2

Schematisch overzicht van de fosfaathuishouding.



- [1] vrijkomend organisch P bij respiratie en afsterving algen, [2] vrijkomen van anorganisch P bij respiratie en afsterven algen, [3] mineralisatie van organisch P, [4] opname van anorganische P door algen, [5] sedimentatie van algen, [6] uitwisseling waterkolom en sediment top laag, [7] mineralisatie van algen in sedimenttop laag, [8] mineralisatie van organisch P in sediment, [9] uitwisseling sediment top- en onderlaag.

In de waterkolom komt organisch gebonden P vrij bij de respiratie en de afsterving van algen. Aangenomen wordt, dat een deel van het vrijkomende fosfaat direct bijdraagt aan de pool met anorganisch P. Ook vanwege de sedimentatie aanwezige algen in het sediment worden omgezet tot organische P. Door mineralisatie komt het P gebonden in de organische stof vrij. Dit proces zal vanwege de anaërobe condities in het sediment aanzienlijk langzamer verlopen in het sediment dan in de waterkolom. Het opgelost anorganisch P in de waterkolom, dat na mineralisatie in de waterkolom vrijkomt, is direct beschikbaar voor de opname door algen.

De mineralisatie in zowel de waterkolom als in het sediment zijn als functie van de temperatuur beschreven. Voor de snelheidsconstanten geldt:

$$[29] \quad \min o = K_{\min} \cdot \theta_{\min}^{(T-20)}$$

$$[30] \quad \min o_B = K_{\min B} \cdot \theta_{\min B}^{(T-20)}$$

Waarin: K_{\min} , $K_{\min B}$ de snelheidsconstante mineralisatie in water en sediment bij 20 °C (dag⁻¹)

θ_{\min} , $\theta_{\min B}$ de temperatuurcoëfficiënten mineralisatie in water en sediment (-)

Onderstaande vergelijkingen geven de balansen voor TOP en TIP in de waterkolom en de top laag van het sediment.

$$[31] \quad \frac{dTOP_W}{dt} = \frac{1}{Z} \cdot (-FTOP_{W_{\min}} + FTOP_{W_{rsp}} + FTOP_D + FTOP_R - FTOP_S)$$

$$[32] \quad \frac{dTOP_B}{dt} = \frac{1}{DZ} \cdot (-FTOP_{B_{\min}} + FTOP_{B_{alg}} - FTOP_D + FTOP_{DL} - FTOP_R + FTOP_S - FTOP_B)$$

Tabel 8.1 Termen in de balansvergelijkingen voor totaal organische fosfaat in waterkolom en sedimenttoplaag

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Mineralisatie organisch fosfaat in de waterkolom	$F_{TOPW_{min}}$	$min_o \cdot TOP_W \cdot Z$
Mineralisatie organisch fosfaat in het sediment	$F_{TOPB_{min}}$	$min_oB \cdot TOP_B \cdot DZ$
Vrijkomen van organisch P bij afbraak algen in sediment	$F_{TOPB_{alg}}$	$a_{pc} \cdot min_aB \cdot AB \cdot DZ$
Vrijkomen van organische P bij respiratie en afsterving algen in de waterkolom	$F_{TOPW_{rsp}}$	$RespT \cdot a_{pc} \cdot f_{porg} \cdot Z$
Diffusie grensvlak water/sediment toplaag	F_{TOPD}	$\frac{E_z}{0.5 \cdot DZ} \cdot (DOP_B - DOP_W)$
Diffusie grensvlak sediment toplaag /onderlaag	F_{TOPDL}	$\frac{E_{z,2}}{0.5 \cdot DZ} \cdot (DOP_B - DOP_{LB})$
Resuspensie van POP en vrijkomen interstitieel water bij resuspensie	F_{TOPR}	$F_{res} \cdot POP_B + V_r \cdot POR \cdot DOP_B$
Sedimentatie van POP en insluiten van interstitieel water bij sedimentatie	F_{TOPS}	$F_{sed} \cdot POP_W + V_r \cdot POR \cdot DOP_W$
Pseudo advection sediment toplaag /onderlaag	F_{TOPB}	als $V_{sd} \geq 0$ $-V_{sd} \cdot TOP_B$

Tabel 8.2 Termen in de balansvergelijkingen voor totaal anorganische fosfaat in waterkolom en sedimenttoplaag

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Mineralisatie organisch fosfaat in de waterkolom	$F_{IPW_{min}}$	$min_o \cdot TOP_W \cdot Z$
Mineralisatie organisch fosfaat in het sediment	$F_{IPB_{min}}$	$min_oB \cdot TOP_B \cdot DZ$
Opname van anorganisch P door algen	$F_{IPW_{gr}}$	$GrT \cdot a_{pc} \cdot Z$
Vrijkomen van anorganisch P bij respiratie en afsterving algen in de waterkolom	$F_{IPW_{rsp}}$	$RespT \cdot a_{pc} \cdot (1 - f_{porg}) \cdot Z$
Diffusie grensvlak water/sediment toplaag	F_{IPD}	$\frac{E_z}{0.5 \cdot DZ} \cdot (DIP_B - DIP_W)$
Diffusie grensvlak sediment toplaag/onderlaag	F_{IPDL}	$\frac{E_{z,2}}{0.5 \cdot DZ} \cdot (DIP_B - DIP_{LB})$
Resuspensie van PIP en vrijkomen interstitieel water bij resuspensie	F_{IPR}	$F_{res} \cdot PIP_B + V_r \cdot POR \cdot DIP_B$
Sedimentatie van PIP en insluiten van interstitieel water bij sedimentatie	F_{IPS}	$F_{sed} \cdot PIP_W + V_r \cdot POR \cdot DIP_W$
Pseudo advection sediment toplaag/onderlaag	F_{IPB}	als $V_{sd} \geq 0$ $-V_{sd} \cdot TIP_B$ als $V_{sd} < 0$ $-V_{sd} \cdot TIP_{LB}$

$$[33] \quad \frac{dTIP_W}{dt} = \frac{1}{Z} \cdot (-FTIPW_{min} + FTIPW_{gr} + FTIPW_{rsp} + FTIPD + FTIPR - FTIPS)$$

$$[34] \quad \frac{dTIP_B}{dt} = \frac{1}{DZ} \cdot (-FTIPB_{min} - FTIPD - FTIPDL - FTIPR + FTIPS + FTIPB)$$

In tabel 8.1 en 8.2 worden de diverse termen in de balansvergelijkingen nader uitgeschreven. Alle termen zijn weergegeven als een flux in $g \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$ en als zodanig als uitvoer te selecteren.

8.2.4 Beschrijving van de stikstofhuishouding

De onderscheiden toestandsvariabelen in de stikstofhuishouding met hun interacties zijn weergegeven in figuur 8.3. Evenals in de fosfaathuishouding is een onderscheid gemaakt tussen opgelost en particulier organisch gebonden stikstof. Ook nu wordt gewerkt met een vaste door de gebruikers op te geven opgeloste fractie.

Organisch gebonden stikstof in de waterkolom wordt gevormd bij de verliesprocessen van algen. Een deel komt direct vrij als ammonium. In de bodem wordt de in gesedimenteerde algen aanwezige stikstof volledig omgezet tot organische gebonden stikstof. Het gevormde organische stikstof in zowel de waterkolom als in het sediment wordt door mineralisatie omgezet. Vrijkomend ammonium of nitraat kunnen in dit model door de introductie van de preferentiefactor allebei dienen als stikstofbron voor de algen.

Aan de stikstofhuishouding liggen drie processen ten grondslag, dit zijn mineralisatie, nitrificatie en denitrificatie.

[1] Bij het eerste proces, mineralisatie, wordt organisch gebonden stikstof afgebroken tot ammonium. Dit proces wordt ook wel ammonificatie genoemd.

[2] Het tweede proces, nitrificatie, verloopt eigenlijk in twee stappen, waarbij ammonium onder aërobe condities door bacteriën wordt omgezet in nitraat. Als tussenproduct ontstaat nitriet (NO_2). Daar de omzetting van nitriet tot nitraat veel sneller gaat dan de omzetting van ammonium tot nitriet, is het nitrificatie proces in EUTROF1A als een éénstapsproces beschreven.

[3] Tenslotte kan nitraat worden omgezet in vrije stikstof (N_2). Dit proces wordt denitrificatie genoemd en verloopt onder zuurstofarme condities. Hierdoor is denitrificatie in de waterkolom veelal te verwaarlozen is en is aangenomen, dat dit proces alleen plaats vindt in het sediment.

Net als mineralisatie van organisch gebonden P zijn ook nitrificatie en denitrificatie in het model afhankelijk van de temperatuur. Voor de snelheidsconstanten geldt:

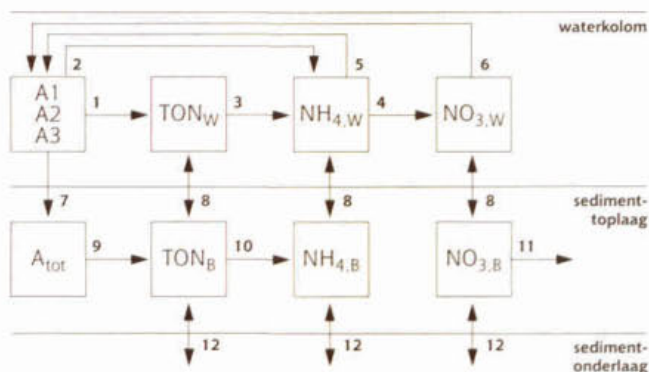
$$[35] \quad nitr = K_{nit} \cdot \theta_{nit}^{(T-20)}$$

$$[36] \quad denit = K_{denitB} \cdot \theta_{denitB}^{(T-20)}$$

Waarin: K_{nit} , K_{denitB} de snelheidsconstante nitrificatie en denitrificatie bij 20 °C (dag^{-1})
 θ_{nit} , θ_{denitB} de temperatuurcoëfficiënten voor mineralisatie in water en sediment (-)

Figuur 8.3

Schematisch overzicht van de Stikstofhuishouding.



[1] vrijkomen organisch N bij respiratie en afsterving algen. [2] vrijkomen van NH₄-N bij respiratie en afsterven algen. [3] mineralisatie van organisch N. [4] nitrificatie. [5] opname van ammonium door algen. [6] opname van nitraat door algen. [7] sedimentatie van algen. [8] uitwisseling waterkolom en sediment toplaag. [9] mineralisatie van algen in sedimenttoplaag. [10] mineralisatie van organisch N in sediment. [11] denitrificatie. [12] uitwisseling sediment top- en onderlaag.

De balansvergelijkingen voor organisch stikstof, ammonium en nitraat worden gegeven door:

$$[37] \quad \frac{d\text{TON}_W}{dt} = \frac{1}{Z} \cdot (-\text{FTON}_{W_{\min}} + \text{FTON}_{W_{\text{rsp}}} + \text{FTOND} + \text{FTONR} - \text{FTONS})$$

$$[38] \quad \frac{d\text{TON}_B}{dt} = \frac{1}{DZ} \cdot (-\text{FTON}_{B_{\min}} + \text{FTON}_{B_{\text{alg}}} - \text{FTOND} + \text{FTONDL} - \text{FTONR} + \text{FTONS} - \text{FTONB})$$

$$[39] \quad \frac{d\text{NH}_{4,W}}{dt} = \frac{1}{Z} \cdot (+\text{FNH}_{4,W_{\min}} - \text{FNH}_{4,W_{\text{nit}}} - \text{FNH}_{4,W_{\text{gr}}} + \text{FNH}_{4,W_{\text{rsp}}} + \text{FNH}_{4,D} + \text{FNH}_{4,R} - \text{FNH}_{4,S})$$

$$[40] \quad \frac{d\text{NH}_{4,B}}{dt} = \frac{1}{DZ} \cdot (+\text{FNH}_{4,B_{\min}} - \text{FNH}_{4,D} - \text{FNH}_{4,DL} - \text{FNH}_{4,R} + \text{FNH}_{4,S} + \text{FNH}_{4,B})$$

$$[41] \quad \frac{d\text{NO}_{3,W}}{dt} = \frac{1}{Z} \cdot (-\text{FNO}_{3,W_{\text{nit}}} + \text{FNO}_{3,W_{\text{gr}}} + \text{FNO}_{3,D} + \text{FNO}_{3,R} - \text{FNO}_{3,S})$$

$$[42] \quad \frac{d\text{NO}_{3,B}}{dt} = \frac{1}{DZ} \cdot (+\text{FNO}_{3,B_{\text{den}}} - \text{FNO}_{3,D} - \text{FNO}_{3,DL} - \text{FNO}_{3,R} + \text{FNO}_{3,S} + \text{FNO}_{3,B})$$

Alle termen in de balansvergelijkingen voor de onderscheiden stikstof vormen zijn nader uitgewerkt in de tabellen 8.3, 8.4 en 8.5.

Tabel 8.3 Termen in de balansvergelijkingen voor totaal organisch stikstof in de waterkolom en sedimenttoplaag.

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Mineralisatie organisch stikstof in de waterkolom	$FTONW_{min}$	$min_o \cdot TON_W \cdot Z$
Mineralisatie organisch stikstof in het sediment	$FTONB_{min}$	$min_oB \cdot TON_B \cdot DZ$
Vrijkomen van organisch N bij afbraak algen in sediment	$FTONB_{alg}$	$a_{nc} \cdot min_aB \cdot AB \cdot DZ$
Vrijkomen van organische N bij respiratie en afsterving algen in de waterkolom	$FTONW_{rsp}$	$RespT \cdot a_{nc} \cdot f_{norg} \cdot Z$
Diffusie grensvlak water/sediment toplaag	$FTOND$	$\frac{E_z}{0.5 \cdot DZ} \cdot (DON_B - DON_W)$
Diffusie grensvlak sediment toplaag/onderlaag	$FTONDL$	$\frac{E_{z,2}}{0.5 \cdot DZ} \cdot (DON_B - DON_{LB})$
Resuspensie van POP en vrijkomen interstitieel water bij resuspensie	$FTONR$	$F_{res} \cdot PON_B + V_r \cdot POR \cdot DON_B$
Sedimentatie van POP en insluiten van interstitieel water bij sedimentatie	$FTONS$	$F_{sed} \cdot PON_W + V_r \cdot POR \cdot DON_W$
Pseudo advectie sediment toplaag/onderlaag	$FTONB$	als $V_{sd} \geq 0$ $-V_{sd} \cdot TON_B$ als $V_{sd} < 0$ $-V_{sd} \cdot TON_{LB}$

Tabel 8.4 Termen in de balansvergelijkingen voor ammonium stikstof in de waterkolom en sedimenttoplaag.

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Mineralisatie organisch stikstof in de waterkolom	FNH_4W_{min}	$min_o \cdot TON_W \cdot Z$
Mineralisatie organisch stikstof in het sediment	FNH_4B_{min}	$min_oB \cdot TON_B \cdot DZ$
Nitrificatie in de waterkolom	FNH_4W_{nit}	$nitr \cdot NH_4 \cdot Z$
Ammonium opname door algen	FNH_4W_{gr}	$GrT \cdot a_{nc} \cdot Pnh_4 \cdot Z$
Ammonium afgifte bij respiratie en afsterving algen	FNH_4W_{rsp}	$Re\ spT \cdot a_{nc} \cdot (1 - f_{norg}) \cdot Z$
Diffusie grensvlak water/sediment toplaag	FNH_4D	$\frac{E_z}{0.5 \cdot DZ} \cdot (NH_{4,1} - NH_{4,W})$
Diffusie grensvlak sediment toplaag/onderlaag	FNH_4DL	$\frac{E_{z,2}}{0.5 \cdot DZ} \cdot (NH_{4,1} - NH_{4,LB})$
Vrijkomen interstitieel water bij resuspensie	FNH_4R	$V_r \cdot POR \cdot NH_{4,1}$
Insluiten van interstitieel water bij sedimentatie	FNH_4S	$V_s \cdot POR \cdot NH_{4,W}$
Pseudo advectie sediment toplaag/onderlaag	FNH_4B	als $V_{sd} \geq 0$ $-V_{sd} \cdot NH_{4,B}$ als $V_{sd} < 0$ $-V_{sd} \cdot NH_{4,LB}$

Tabel 8.5 Termen in de balansvergelijkingen voor nitraat stikstof in de waterkolom en sedimenttoplaag.

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Denitrificatie in het sediment	FNO_3B_{den}	$denitB \cdot NO_{3,W} \cdot DZ$
Nitrificatie in de waterkolom	FNO_3W_{nit}	$nitr \cdot NH_4 \cdot Z$
Nitraat opname door algen	FNO_3W_{gr}	$GrT \cdot a_{nc} \cdot Pnh_4 \cdot Z$
Diffusie grensvlak water/ sediment toplaag	FNO_3D	$\frac{E_z}{0.5 \cdot DZ} \cdot (NO_{3,I} - NO_{3,W})$
Diffusie grensvlak sediment toplaag /onderlaag	FNO_3DL	$\frac{E_{z,2}}{0.5 \cdot DZ} \cdot (NO_{3,I} - NO_{3,LB})$
Vrijkomen interstitieel water bij resuspensie	FNO_3R	$V_r \cdot POR \cdot NO_{3,I}$
Insluiten van interstitieel water bij sedimentatie	FNO_3S	$V_s \cdot POR \cdot NO_{3,W}$
Pseudo advectie sediment toplaag/onderlaag	FNO_3B	als $V_{sd} \geq 0$ $-V_{sd} \cdot NO_{3,B}$ als $V_{sd} < 0$ $-V_{sd} \cdot NO_{3,LB}$

8.3 Benodigde invoer

8.3.1 Initiële condities

Voor alle toestandsvariabelen moet op het tijdstip van de aanvang van de simulatie een waarde worden opgegeven. In een aantal gevallen kan dat op basis van metingen. Voor complexe netwerken is dit echter niet eenvoudig. In dat geval kan een schatting worden verkregen door het uitvoeren van een aantal inleidende simulaties. Het gebruik van de optie 'new initial conditions', te vinden in de scenario manager is hierbij handig. Men dient er rekening mee te houden, dat vooral in systemen met een lange verblijftijd het effect van een verkeerde keuze van de initiële condities lang kan doorwerken in de resultaten van de simulatie. In het model voor een conservatieve stof (zie hoofdstuk 1) wordt hier nader op ingegaan.

Feitelijk is het langzaamste proces bepalend voor de insteltijd. Voor dit model geldt, dat met name de biologische processen in het sediment en de sediment-water uitwisseling langzaam zijn. Dit betekent, dat de resultaten daardoor sterk afhankelijk kunnen zijn van de keuze van de beginconcentraties in het sediment. Deze dienen dan ook nauwkeurig te worden vastgesteld, hetgeen de nodige meetinspanning vergt. Probleem hierbij is, dat vooral het vaststellen van poriewaterconcentraties ingewikkelde meettechnieken vereist, terwijl deze niet altijd voorhanden zijn. Eventueel kan het inrekenen van het model voor deze variabelen uitkomst bieden. Het is in dat geval verstandig om de gevoeligheid van de uitkomsten voor de gemaakte aannames te onderzoeken.

8.3.2 Randvoorwaarden

Op de geografische randen moet de toestand van het systeem worden opgegeven. Daarnaast worden in DUFLOW ook alle puntlozingen als randvoorwaarden behandeld.

Tabel 8.6

Benodigde invoer model EUTROF2A

Type	Naam	Bron	Typische Waarde
Initiële condities	A ₁ Biomassa alg 1	meting.	g C.m ⁻³
	A ₂ Biomassa alg 2	schatting.	g C.m ⁻³
	A ₃ Biomassa alg 3	inrekenen	g C.m ⁻³
	NH _{4,W} Ammonium N waterkolom		g N.m ⁻³
	NO _{3,W} Nitraat N waterkolom		g N.m ⁻³
	TIP _W Anorganische P waterkolom		g P.m ⁻³
	TON _W Organisch N waterkolom		g N.m ⁻³
	TOP _W Organisch P waterkolom		g P.m ⁻³
	SS _W Zwevende stof waterkolom		g C.m ⁻³
	A _B Totaal algen biomassa sediment		g.m ⁻³
	NH _{4,B} Ammonium N sedimenttoplaag		g N.m ⁻³
	NH _{4,LB} Ammonium N sedimentonderlaag		g N.m ⁻³
	NO _{3,B} Nitraat N sedimenttoplaag		g N.m ⁻³
	NO _{3,LB} Nitraat N sedimentonderlaag		g N.m ⁻³
	TIP _B Anorganisch P sedimenttoplaag		g P.m ⁻³
	TIP _{LB} Anorganisch P sedimentonderlaag		g P.m ⁻³
	TON _B Organisch N sedimenttoplaag		g N.m ⁻³
	TON _{LB} Organisch N sedimentonderlaag		g N.m ⁻³
	TOP _B Organisch P sedimenttoplaag		g P.m ⁻³
	TOP _{LB} Organisch P sedimentonderlaag		g P.m ⁻³
Randvoorwaarden	Concentratie of belasting op systeemgrenzen en van puntlozingen voor:	meting of schatting	
	A ₁ Biomassa alg 1		g C.m ⁻³
	A ₂ Biomassa alg 2		g C.m ⁻³
	A ₃ Biomassa alg 3		g C.m ⁻³
	NH _{4,W} Ammonium N waterkolom		g N.m ⁻³
	NO _{3,W} Nitraat N waterkolom		g N.m ⁻³
	TIP _W Anorganische P waterkolom		g P.m ⁻³
	TON _W Organisch N waterkolom		g N.m ⁻³
	TOP _W Organisch P waterkolom		g P.m ⁻³
	SS _W Zwevende stof waterkolom		g.m ⁻³
Parameters	achlc1 Chlorofyl koolstof verhouding alg 1	literatuur	zie tabel 8.7
	achlc2 Chlorofyl koolstof verhouding alg 2		
	achlc3 Chlorofyl koolstof verhouding alg 3		
	anc N koolstof verhouding algen en detritus	literatuur	zie tabel 8.8
	apc P koolstof verhouding algen en detritus		
	e0 Achtergrond extinctie	meting	1-4 m ⁻¹
	ealg Specifieke extinctie algen	literatuur	0.014-0.018
	EZ Mechanische dispersie water sediment	literatuur	5 x 10 ⁻⁵ m ² .dag ⁻¹
	eSS Specifieke extinctie zwevende stof	literatuur	0.05
	fdNO _b Fractie opgelost org-N sediment	meting/	streekspecifiek
	fdNO _w Fractie opgelost org-N waterkolom	schatting	
	fdPO _b Fractie opgelost org-P sediment		
	fdPO _w Fractie opgelost org-P waterkolom		
	fnorg Fractie org-N die vrijkomt bij respiratie	literatuur	0.8
	fporg Fractie org-P die vrijkomt bij respiratie		0.8
	FOSB Fractie organische stof in het sediment	meting	streekspecifiek
	DZ Dikte van de sedimenttoplaag		
	Is1 Optimale lichtintensiteit alg 1	literatuur	Zie tabel 8.6
	Is2 Optimale lichtintensiteit alg 2		
	Is3 Optimale lichtintensiteit alg 3		
KDAb Anaerobe afbraaksnelheid algen in sediment		10 ⁻⁴ dag ⁻¹	

Tabel 8.6 vervolg

Type	Naam	Bron	Typische Waarde
Parameters	vervolg		
	KdenB Denitrificatiesnelheid sediment		$10^{-2} - 10^{-1} \text{ dag}^{-1}$
	kdie1 Afsterfsnelheid alg 1		zie tabel 8.6
	kdie2 Afsterfsnelheid alg 2		
	kdie3 Afsterfsnelheid alg 3		
	Kdno O ₂ monod constante denitrificatie	literatuur	$1-2 \text{ g O}_2 \cdot \text{m}^{-3}$
	Kmin Decompositiesnelheid organische stof water	literatuur	$10^{-2} - 10^{-1} \text{ dag}^{-1}$
	KminB Decompositiesnelheid organische stof sediment		$10^{-3} - 10^{-2} \text{ dag}^{-1}$
	Kn1 Monod constante N alg 1	literatuur	zie tabel 8.6
	Kn2 Monod constante N alg 2		
	Kn3 Monod constante N alg 3		
	Knit Nitrificatie snelheid waterkolom	literatuur	$0.1-0.3 \text{ dag}^{-1}$
	Kno O ₂ monod constante nitrificatie		$2 \text{ g O}_2 \cdot \text{m}^{-3}$
	Kp1 Monod constante P alg 1	literatuur	Zie tabel 8.6
	Kp2 Monod constante P alg 2		
	Kp3 Monod constante P alg 3		
	KpIPb Partitie constante P sediment	meting	streekspecifiek
	KpIPw Partitie constante P waterkolom	literatuur	
	Kres1 Respiratiesnelheid alg 1	literatuur	zie tabel 8.6
	Kres2 Respiratiesnelheid alg 2		
	Kres3 Respiratiesnelheid alg 3		
	POR Porositeit sediment	meting	0.6-0.9
	Pnh4 Ammoniumpreferentie factor	literatuur	0.6 - 1
	RHOANO Dichtheid anorganische stof	literatuur	$2600 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
	RHOORG Dichtheid organische stof		$1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
	TDAB Temperatuurcoëf. afbraak algen sediment	literatuur	1.040- 1.080
	TDEN Temperatuurcoëf. denitrificatie waterkolom		
	TDENB Temperatuurcoëf. denitrificatie sediment		
	TGA1 Temperatuurcoëf. groei alg 1		
	TGA2 Temperatuurcoëf. groei alg 2		
	TGA3 Temperatuurcoëf. groei alg 3		
	TMIN Temperatuurcoëf. decompositie waterkolom		
	TMINB Temperatuurcoëf. decompositie sediment		
	TNIT Temperatuurcoëf. nitrificatie		
	TRA1 Temperatuurcoëf. respiratie alg 1		
	TRA2 Temperatuurcoëf. respiratie alg 2		
	TRA3 Temperatuurcoëf. respiratie alg 3		
	Umax1 Maximale groeisnelheid alg1	literatuur	zie tabel 8.6
	Umax2 Maximale groeisnelheid alg2		
	Umax3 Maximale groeisnelheid alg3		
	Vsa1 Sedimentatiesnelheid alg 1	literatuur	zie tabel 8.6
	Vsa2 Sedimentatiesnelheid alg 2		
	Vsa3 Sedimentatiesnelheid alg 3		
	Vsn Sedimentatiesnelheid organisch N en P		
	Vss Sedimentatiesnelheid zwevende stof		
Externe variabelen	D Dispersieconstante	literatuur	zie hoofdstuk 1
	T Temperatuur	meting/	
	I _a Daggemiddelde lichtintensiteit	KNMI	6-16 uur
	L Daglengte	Meting	
	F _{res} Resuspensie flux		
Flow	Z Diepte	DUFLOW	m waterbeweging

Voor elke debiet- of peilrand in het model moet aan elke toestandsvariabele in de waterkolom een waarde worden toegekend. Het probleem is, dat niet alle in het model gebruikte toestandsvariabelen worden gemeten. De concentraties van een aantal onderscheiden variabelen moet daarom worden geschat op basis van andere wel gemeten grootheden.

Zo wordt de algenbiomassa van elke van de drie onderscheiden soorten in het model uitgedrukt in $g\ C.m^{-3}$. In de praktijk wordt echter het chlorofylgehalte gemeten. Dit kan eventueel met behulp van de in het model gebruikte vaste verhouding tussen koolstof en chlorofyl worden (a_{cchl}) omgerekend.

Een onderverdeling in verschillende algentypen kan worden gemaakt op basis van de aangetroffen soorten samenstelling. Een accurate invoering van de algenparameters is echter geen eenvoudige zaak en vraagt de nodige aannames. In de praktijk zal dan ook veelal worden aangenomen, dat gedurende een bepaalde periode één algensoort dominant is.

Uit de Kjeldahl-stikstof en de ammonium concentraties kan het gehalte aan TON worden bepaald. Het bepalen van het gehalte aan TOP is minder eenvoudig. Meestal zijn slechts totaal fosfaat en de concentratie aan orto-fosfaat bekend. Ook hier geldt dat verschillende aannames nodig zijn om het fosfaat onder te verdelen in de onderscheiden fracties. Het is verstandig om met een gevoeligheidsanalyse te achterhalen wat het effect is van de gemaakte aannames.

8.3.3 Parameters

Ten opzichte van het eenvoudige model EUTROF1A is het aantal parameters in dit model sterk toegenomen. EUTROF2A telt ca. 65 parameters en constanten waaraan een waarde moet worden toegekend. Voor het verkrijgen van een schatting van de waarde voor de parameters is men vooral aangewezen op de literatuur. Sommige parameters zijn ook experimenteel of door kalibratie vast te stellen. Hieronder wordt een overzicht gegeven van een aantal typische waarden voor de belangrijkste parameters van het model.

ALGENGROEI

Door keuze van karakteristieke waarden kan met het model op eenvoudige wijze de successie van kiezelalgen, groenalgen naar blauwalgen worden gesimuleerd.

Tabel 8.7 Karakteristieke waarden van de parameters in de algenbalans-vergelijking voor een aantal algengroepen.

Soort/groep	μ_{max} dag ⁻¹	I_{opt} W.m ⁻²	k_{loss} dag ⁻¹	K_P mgP.l ⁻¹	K_N mgN.l ⁻¹	θ_{ga} (-)	a_{cA} μgChl.mgC ⁻¹
Algemeen	1.0-3.0		0.05-0.3	0.004-0.08	0.01-0.40	1.066	17
Diatomeën	1.6-2.5	88-100	-	-	-	-	9-53
Groen Algen	1.6-2.8	88-100	-	-	-	-	21-48
Cyanobacteriën	0.3-2.0	44-50	-	-	-	-	11-27

Uit de tabel blijkt, dat de verhouding chlorofyl/koolstof sterk kan variëren tussen de verschillende soorten algen. Verschillen binnen een algensoort ontstaan door de

mogelijkheid tot adaptie aan de lichtomstandigheden. Hierdoor varieert het chlorofyl gehalte van een algensoort.

STOECHIOMETRIE

Op basis van een "gemiddelde" samenstelling van een alg (en van organische stof) ($C_{106}H_{179}N_{16}O_{46}P$) kan men afleiden, dat de verhoudingsgetallen a_{NC} en a_{PC} respectievelijk gelijk zijn aan 0.176 mg N/mgC en 0.024 mg P/mgC. Het is echter bekend, dat de samenstelling van zowel het algenmateriaal, als de organische stof erg variabel is. Zo kunnen algen bijvoorbeeld interne fosfaatreserves aanleggen, waardoor ongunstige omstandigheden makkelijker worden doorstaan. In tabel 8.8 zijn een aantal waarden vermeld voor diverse algengroepen.

Tabel 8.8 *Stoechiometrische verhoudingen voor een aantal algengroepen*

Soort/groep	a_{PC}	a_{NC}
Groen Algen	0.016-0.040	0.09-0.16
Cyanobacteriën	0.009-0.014	0.11-0.15

LICHTKLIMAAT

Een uitgebreid overzicht van de factoren die het onderwaterlichtklimaat bepalen wordt gegeven in hoofdstuk 6, getiteld het lichtklimaat onder water. Het beschreven model in dat hoofdstuk kan worden geïmplementeerd in EUTROF2A. Doet men dit niet dan bevat de achtergrond extinctie ook de bijdrage van opgelost organische verbindingen (gelbstoff). Indien wordt aangenomen dat de bijdrage van gelbstoff niet varieert in de tijd dan kan de achtergrondextinctie worden berekend uit de totaal gemeten extinctie coëfficiënt (eventueel geschat uit de Secchi-diepte). Deze moet dan wel gecorrigeerd worden voor de bijdrage van zwevende stof en chlorofyl. Deze twee stoffen worden immers in het model bij de berekening van de totale extinctie opgeteld. Nalating van de correctie voor zwevend stof en chlorofyl betekent daardoor dat deze extra worden meegeteld bij de berekening van de totale extinctie in het model.

SEDIMENT WATER UITWISSELING

Voor de diffusie van opgeloste stoffen wordt het door Portielje (1992) gehanteerde concept van mechanische dispersie gebruikt. Vergelijking 4 beschrijft hoe volgens dit concept de diffusieconstante afneemt met de diepte in het sediment. Feitelijk bevat vergelijking 4 drie parameters, waarvan er in het model twee vast zijn ingegeven en de derde parameter de variabele waterdiepte is. De eerste vaste coëfficiënt geeft aan hoe snel de bijdrage van de mechanische diffusie afneemt met de diepte. Deze parameter heeft een waarde gelijk aan 50 en is op de experimenten van Portielje gebaseerd. De tweede vaste parameter, $E_{z,0}$, is de waarde van de mechanische dispersie aan het grensvlak. Deze waarde hangt af van de turbulentie aan de grenslaag, waardoor de parameter sterk in grootte kan variëren. Gekozen is voor een waarde die representatief is voor gemiddeld heersende condities. In het algemeen geldt, dat het model niet erg gevoelig is voor de keuze van de parameters.

Belangrijker voor de uitwisseling tussen het sediment en het water is de dikte van de actieve toplaag. Het model is hier wel gevoelig voor. Het is niet eenvoudig om hier een verstandige keuze voor te maken. Soms kan echter op basis van een visuele beoordeling van een ongestoord sedimentmonster een indruk worden verkregen. Ook gemeten concentratiegradiënten in de bovenste sedimentlaag kunnen gebruikt worden voor het vaststellen van een redelijke waarde voor DZ. Een veel gebruikte waarde ligt tussen de 5 en 10 cm. Ook hier is het uitvoeren van een gevoeligheidsanalyse op zijn plaats, omdat de keuze voor een te dikke toplaag tot een te trage respons van het systeem leidt op bijvoorbeeld veranderingen in de externe belasting.

Een schatting van de porositeit van het sediment kan worden verkregen uit het vochtgehalte van de toplaag. Hiertoe bepaalt men het droge stof gehalte van een hoeveelheid nat ingewogen sediment.

Voor particulier gebonden verontreinigingen geldt dat de uitwisseling wordt bepaald door sedimentatie en resuspensie. Voor het berekenen van deze fluxen wordt verwezen naar hoofdstuk 4 en 5, respectievelijk getiteld Slibstroom en Slibmeer.

8.3.4 Externe variabelen

Het model verlangt ook een declaratie van een viertal externe variabelen. Deze variabelen kunnen als functie van de tijd worden ingevoerd. De externe variabelen zijn: temperatuur, daggemiddelde intensiteit, daglengte en resuspensie-flux.

8.4 Uitvoer

Naast de in het model onderscheiden toestandsvariabelen is het mogelijk een groot aantal andere grootheden als uitvoer te selecteren. In principe zijn alle grootheden die in het EUTROF2A.MOD bestand worden berekend op te vragen. Verwezen wordt onder meer naar de in de tabellen 8.1 tot en met 8.5 gedefinieerde termen van de nutriëntbalansen. Een aantal andere grootheden, waarvan de uitvoer mogelijk interessant kan zijn weergegeven in tabel 8.9.

Voor een aantal grootheden, zoals: het totaal chlorofylgehalte, de extinctie coëfficiënt en de concentraties aan de onderscheiden vormen van nutriënten zal het duidelijk zijn, dat de uitvoer hiervan nuttig kan zijn. Echter ook het bestuderen van andere grootheden kan interessant zijn en het inzicht in het functioneren van het systeem vergroten. Zo kunnen bijvoorbeeld de uitvoergegevens van de limitatiefactoren het inzicht in de dynamiek van de groei van algen vergroten en geeft de grootheid GrT een beeld van de productiviteit van het systeem.

Hiernaast worden, in aansluiting met wat vaak in de praktijk wordt gemeten, eveneens de volgende concentraties berekend:

Het totaal P gehalte in de waterkolom:

$$[43] \quad \text{PTOT}_W = a_{pc} \cdot \sum_{i=1}^3 A_i + \text{TOP}_W + \text{TIP}_W$$

Tabel 8.9

Aantal interessante uitvoervariabelen in het model EUTROF2A

Symbol	Omschrijving	Eenheid
Fsed	Sedimentatieflux	$\text{g.m}^{-2}.\text{dag}^{-1}$
Fres	Resuspensieflux	$\text{g.m}^{-2}.\text{dag}^{-1}$
Chla	Totaal gehalte chlorofyl	mg.m^{-3}
etot	Totale extinctie coëfficiënt	m^{-1}
fli	Lichtlimitatiefactor alg i	-
fti	Temperatuurlimitatiefactor alg i	-
fni	Nutriëntenlimitatiefactor alg i	-
Gri	Werkelijke groeisnelheid alg i	dag^{-1}
Lossi	Totaal verliesnelheid alg i	dag^{-1}
GrT	Totale koolstofproductie	$\text{g C.m}^{-3}.\text{dag}^{-1}$
RespT	Totale koolstofverlies door respiratie en afsterving	$\text{g C.m}^{-3}.\text{dag}^{-1}$
DINW	Totaal opgelost anorganisch stikstof	g N.m^{-3}
NO3I	Nitraatgehalte in poriewater	g N.m^{-3}
NH4I	Ammoniumgehalte in poriewater	g N.m^{-3}
DONW	Opgelost organisch stikstof waterkolom	g N.m^{-3}
DONB	Opgelost organische stikstof in poriewater	g N.m^{-3}
PONW	Particulair organische stikstof in waterkolom	g N.g SS^{-1}
PONB	Particulair organische stikstof in sediment	g N.g Sed^{-1}
fdpW	Fractie opgelost anorganisch P waterkolom	-
fdpB	Fractie opgelost anorganisch P sediment	-
DIPW	Opgelost anorganisch P waterkolom (orto-P)	g P.m^{-3}
DIPB	Opgelost anorganisch P in poriewater	g P.m^{-3}
PIPW	Particulair anorganisch P in waterkolom	g P.g SS^{-1}
PIPB	Particulair anorganisch P in sediment	g P.g Sed^{-1}
DOPW	Opgelost organisch P in waterkolom	g P.m^{-3}
DOPB	Opgelost organisch P in poriewater	g P.m^{-3}
POPW	Particulair organisch P in waterkolom	g P.g SS^{-1}
POPB	Particulair organisch P in sediment	g P.g Sed^{-1}
PTOTW	Totaal P gehalte in de waterkolom	g P.m^{-3}
NTOTW	Totaal N gehalte in de waterkolom	g N.m^{-3}
KJNW	Kjeldahl stikstof concentratie in de waterkolom	g N.m^{-3}
PTOTB	Totaal P gehalte sediment	g P.g Sed^{-1}
NTOTB	Totaal stikstofgehalte in het sediment	g N.g Sed^{-1}

De concentratie aan Kjeldahl-stikstof in de waterkolom:

$$[44] \quad \text{KJN} = a_{\text{nc}} \cdot \sum_{i=1}^3 A_i + \text{TON}_W + \text{NH}_{4,W}$$

Het totaal stikstofgehalte in de waterkolom:

$$[45] \quad \text{NTOT}_W = \text{KJN} + \text{NO}_{3,W}$$

Het totaal P gehalte in het sediment uitgedrukt per g droge stof:

$$[46] \quad \text{PTOT}_B = \frac{\text{TIP}_B + \text{TOPN}_B}{\text{SS}_B}$$

Het totaal N gehalte in het sediment uitgedrukt per g droge stof:

$$[47] \quad NTOT_B = \frac{TON_B}{SS_B}$$

De benodigde uitvoer wordt geselecteerd in het scenario menu commando 'calculation settings' DUFLOW tab, 'output variables'. Het is overigens verstandig om het aantal uit te voeren variabelen te beperken, omdat zeker bij grote netwerken en bij lange simulaties anders extreem grote uitvoerbestanden worden aangemaakt.

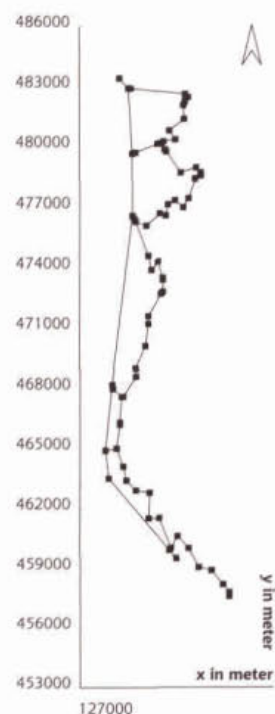
8.5 Voorbeeld Vecht

Dit voorbeeld is ontleend aan een modelstudie naar de Vecht. Doel is vooral te laten zien dat het model ook in complexe situaties kan worden gebruikt. Het systeem dat gesimuleerd wordt, is zowel complex wat betreft de waterhuishouding en waterbeweging als wat betreft de vele lozingen die er op plaatsvinden. Nadeel van een dergelijk complex voorbeeld is dat niet alle invoer in detail kan worden besproken en dat ook de resultaten niet zonder grondige studie van, of voorkennis over het systeem kunnen worden geïnterpreteerd. Voor dit illustratieve voorbeeld is om die reden de invoer vereenvoudigd. Alle lozingen op het systeem hebben daarom een constant debiet. Wel worden op de randen van het systeem in de tijd variërende debieten opgelegd. Ook voor de kwaliteit van de lozingen is gewerkt met een gemiddelde concentratie.

8.5.1 Situatieschets

Figuur 8.4 geeft een schematisch overzicht van het watersysteemmodel Vecht. De Vecht stroomt van de Stad Utrecht in noordelijke richting en staat in open verbinding met het Amsterdam-Rijnkanaal. In de zomermaanden wordt in het Noorden vanuit het IJmeer water ingelaten. Als gevolg hiervan is gedurende deze periode in het noordelijk deel van de Vecht de stroomrichting van noord naar zuid. Terwijl in het zuidelijk deel, van Utrecht tot de Sluis bij Nigtevecht het water naar het noorden stroomt. Door bij laag water op het Noordzeekanaal te spuien ontstaat op de boezem van het Amsterdam-Rijnkanaal een pseudo-getijde beweging, die zich in de Vecht voortplant en tot in de stad Utrecht merkbaar is. Op dit systeem lozen een groot aantal RWZI's en slaan een groot aantal polders water uit. Daarnaast wordt er in de zomermaanden water ingelaten vanuit de Vecht.

Figuur 8.4 Watersysteemmodel Vecht >



8.5.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

Er is een vrij gedetailleerde schematisering van de Vecht gemaakt. Bij de indeling in secties en knopen, is rekening gehouden met de ligging van lozingspunten, knooppunten van waterwegen en met veranderingen in het dwarsprofiel. Hierbij is gebruik gemaakt van gedetailleerde lozingskaarten van Rijkswaterstaat, waarop om de 50 m een dwarsprofiel wordt aangegeven. Indien in een traject het oppervlak van een profiel meer dan 10-20 % varieerde is een nieuwe sectie gedefinieerd. Het Amsterdam-Rijnkanaal is met minder detail geschematiseerd. In de verbindingen tussen de Vecht en het Amsterdam-Rijnkanaal zijn fictieve waterwerken opgenomen. Dit biedt de mogelijkheid om deze af te sluiten en op deze wijze de Vecht te isoleren van het Amsterdam-Rijnkanaal. Eén van de verbindingen wordt in de wintermaanden afgesloten door middel van een sluis. In DUFLOW wordt deze sluis eveneens gesimuleerd.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor de waterbeweging zijn bepaald met 'new initial conditions' (zie hiervoor Hoofdstuk 1 paragraaf 1.3.1). Hiertoe is een periode van een maand doorgerekend. Op deze wijze is een schatting verkregen van het initiële peilverloop en de waterverdeling in het systeem.

De keuze van de initiële concentraties van stoffen in de waterkolom is in deze simulatie niet zo belangrijk. Het model rekent snel in, waardoor na enkele dagen het effect van de keuze van de initiële condities al is verdwenen. In dit voorbeeld zijn voor deze condities gemeten waarden gebruikt, die zijn waargenomen op het tijdstip van de aanvang van de simulatie.

Voor de waterbodem is de keuze van de initiële condities door de trage insteltijd wel van belang. Hiervoor is gebruik gemaakt van gegevens afkomstig van een uitgebreid onderzoek naar de waterbodem kwaliteit. In het kader daarvan is op een groot aantal punten de samenstelling van het sediment bepaald. Aan de hand van dit onderzoek is per sectie een zo goed mogelijke schatting van de begintoestand gemaakt.

RANDVOORWAARDEN

De randen van het watersysteemmodel Vecht worden gevormd door het begin van de Vecht bij de Rode Brug (de Weerdsuis, knoop 2), de sluis bij Muiden (het IJmeer, knoop 55), Het Amsterdam-Rijnkanaal bij Amsterdam (knoop 87) en het Amsterdam-Rijnkanaal bij Utrecht (knoop 70). Op knoop 2 en 87 is een debietrand opgelegd. Hierbij is gebruik gemaakt van meetgegevens afkomstig van daar geplaatste ADM's. Er is gerekend met daggemiddelde waarden. Op knoop 70 zijn gemeten waterpeilen als randvoorwaarde gebruikt. Aan de noordkant van het systeem zijn eveneens debieten opgelegd. Deze debieten zijn berekend uit geregistreerde peilen en schuifstanden, bij de sluis bij Muiden. Ook hier zijn daggemiddelde waarden gebruikt. Voor alle tijdseries geldt dat slechts gegevens voor een periode van een jaar beschikbaar waren. Om toch 5 jaar te simuleren is 5 maal dezelfde dataset van een jaar als randvoorwaarde ingevoerd.

Voor de lozingen van de RWZI's en industriële lozingen waren gemeten dagsommen beschikbaar. Het uitgeslagen water door polders is berekend op basis van draaiuren en pompcapaciteiten. Inlaten naar polders zijn geschat op basis van een waterbalans. In het model voor micro-verontreinigingen is gewerkt met jaargemiddelde waarden voor de debieten van alle lozingen.

Voor alle lozingen en systeemranden zijn voor de onderscheiden toestandsvariabelen concentraties als randvoorwaarden opgelegd. Waarden zijn afkomstig van een intensief meetprogramma. In het kader hiervan zijn een groot aantal lozingen over een periode van een jaar bemonsterd, waarvan de meeste lozingen zijn bemonsterd met een frequentie van eens per maand. Voor een aantal niet bemeten polders is op basis van bekende gegevens een schatting gemaakt. Als randvoorwaarden zijn jaargemiddelden ingevoerd.

Voor een aantal belangrijke lozingen, waarvan de kwaliteit een duidelijk seizoensinvloed toonde, zijn de concentraties als functie van de tijd ingevoerd. Er is gesimuleerd over een periode van 5 jaar. Daar slechts gegevens over een periode van één jaar beschikbaar waren zijn alle tijdseries vijf maal herhaald.

Gemeten chlorofylgehalten zijn met de vaste koolstof/chlorofyl verhouding omgerekend naar een algenbiomassa uitgedrukt in koolstof. Dit was in dit geval eenvoudig, omdat er slechts één soort alg wordt gesimuleerd. Het gehalte aan organisch gebonden stikstof in de lozingen is berekend op basis van aanwezige gegevens over ammonium- en Kjeldahl-stikstof. Fosfaat is onderverdeeld in de onderscheiden fracties, zoals weergegeven in paragraaf 8.3.2, waarbij een constante verhouding tussen particulier organische en anorganisch P is aangehouden. Verder is aangenomen, dat alle organisch P in particuliere vorm aanwezig is.

EXTERNE VARIABELEN

De waarde van de dispersie is voor het hele systeem constant verondersteld. Er is gebruik gemaakt van een waarde van $25 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Met deze waarde bleek het mogelijk de in het systeem optredende gradiënten in chloride en sulfaat redelijk te beschrijven.

Lichtgegevens en daglengtes zijn afkomstig van het KNMI. Voor de watertemperatuur zijn gemeten waarden gebruikt. De resuspensieflux is door kalibratie vastgesteld. Hierbij is de sedimentatiesnelheid vast gekozen en is de resuspensieflux zodanig gevarieerd, dat de gemeten en gesimuleerde zwevende stof gehalten zo goed mogelijk met elkaar in overeenstemming zijn.

PARAMETERS

EUTROF2A bevat een groot aantal parameters, waarvan de gevoeligheid van het model per parameter nogal verschilt. De parameters, waarvoor het model het gevoeligst is, zijn gevarieerd, waarbij de parameters zijn geoptimaliseerd door vergelijking van de berekende concentraties met de gemeten waarden. Hierbij is in eerste instantie gelet op het absolute niveau van de gehalten en in tweede instantie de dynamiek van het concentratieverloop. Uitgangspunt vormden de default waarden zoals die in het model zijn weergegeven.

De kalibratie is uitgevoerd in een aantal stappen. Eerst is de dynamiek van de algenbiomassa zo goed mogelijk met de werkelijkheid in overeenstemming gebracht. Daarna zijn de stikstof- en fosfaathuishouding gekalibreerd. Dit is voor dit systeem geoorloofd, omdat bij de hoge nutriëntenbelasting in dit systeem, de groei van algen niet wordt gelimiteerd door nutriënten.

De twee parameters, die van belang zijn voor de beschrijving van de groei van algen zijn de I_5 en μ_{max} . Voor dit systeem bleek dat het model niet erg gevoelig was voor de waarde van I_5 . De maximale groeisnelheid van de algen is dan ook gebruikt om de dynamiek in het verloop van de biomassa af te regelen.

Aangenomen is dat zowel organische stikstof als fosfaat alleen in particuliere vorm voorkomen. Dit betekent, dat de organische nutriënten volledig onderhevig zijn aan sedimentatie en dat de uitwisseling met de bodem alleen verloopt via diffusie. De sedimentatiesnelheid van organische stof is dan ook gebruikt om de gesimuleerde gehalten aan TON en TOP af te regelen. De aldus gevonden waarde is gelijk aan $0,25 \text{ m} \cdot \text{dag}^{-1}$, hetgeen iets hoger is dan die van levende algen. Dit is een vrij algemeen waargenomen verschijnsel (Van Duin, 1992). Om het ammonium gehalte in overeenstemming te brengen met de meetwaarden zijn zowel de mineralisatiesnelheid van organische stof als de nitrificatiesnelheid gevarieerd.

Voor de Vecht zijn kolomexperimenten uitgevoerd, die inzicht geven in de orde van grootte van de naleveringsflux van fosfaat door diffusie. Deze gemeten fluxen zijn gebruikt om de sediment-water uitwisseling te kalibreren. De parameters waarmee deze fluxen zijn afgeregeld zijn de partiticoëfficiënten voor fosfaat in het sediment en de waterkolom. Er werd een hogere waarde voor de partiticoëfficiënt in de waterkolom gevonden. Hetgeen te verklaren is uit het feit dat de binding van fosfaat in de waterkolom sterker is dan in het sediment waar anaërobe condities heersen.

Voor een volledige lijst met de gebruikte waarden voor de parameters wordt verwezen naar bijlage 2 en het DUFLOW parameterbestand.

CALCULATION SETTINGS

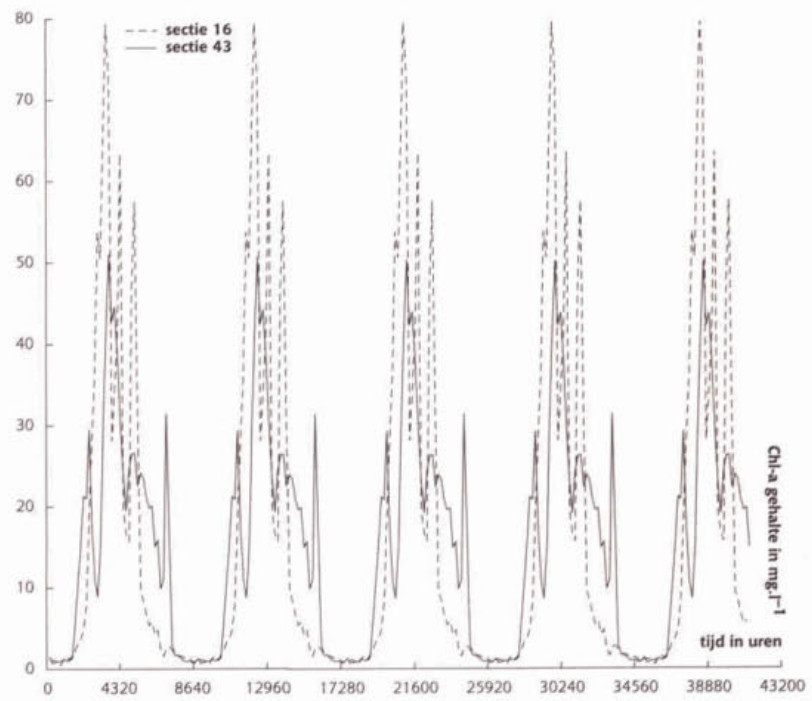
Voor de waterbeweging is een tijdstap gebruikt van 2 uur. Deze is proefondervindelijk vastgesteld. Voor de kwaliteit kan met een tijdstap van 1 dag (24 uur) worden gerekend. Het gebruik van een grotere tijdstap is in dit model niet mogelijk, daar als invoer het daggemiddelde van de lichtgegevens wordt gebruikt. Als uitvoerinterval is eens per week gekozen. De totale duur van de simulatie is 5 jaar. Daar het gaat om een simulatie over een lange periode is gedetailleerde uitvoer niet interessant en door een groot uitvoer interval te kiezen wordt de grootte van het uitvoer bestand (*.rek) beperkt. De grootte van dit bestand is ook beperkt door slechts een beperkt aantal variabelen uit te voeren (te selecteren in 'output variables' in 'calculation settings').

8.5.3 Resultaten

In dit voorbeeld is een simulatie uitgevoerd met het gekalibreerde model voor de huidige situatie. De totale simulatieperiode bedroeg 5 jaar. Weergegeven zijn een aantal variabelen in de waterkolom en een voorspelling van het gehalte fosfaat in de bodem over de periode van 5 jaar. Uitvoer is weergegeven voor de secties 16 en 43, respectievelijk representatief voor het zuidelijk en noordelijk deel van de Vecht. De concentraties in de waterkolom zijn slechts weergegeven over het eerste jaar van de simulatie. De resultaten laten zien dat de waterkwaliteit in het noordelijk deel van de Vecht beduidend beter zijn dan in het zuiden. De gehalten aan nutriënten en ook de algenbiomassa zijn hier lager. Dit is toe te schrijven aan de positieve invloed van het IJmeer. Het verloop van de P concentratie in de bodem laat zien dat het model voorspelt dat er bij de huidige belasting in het zuiden nog oplading van het sediment plaatsvindt. In het noorden blijven de gehalten in het sediment nagenoeg constant of nemen zelfs iets af.

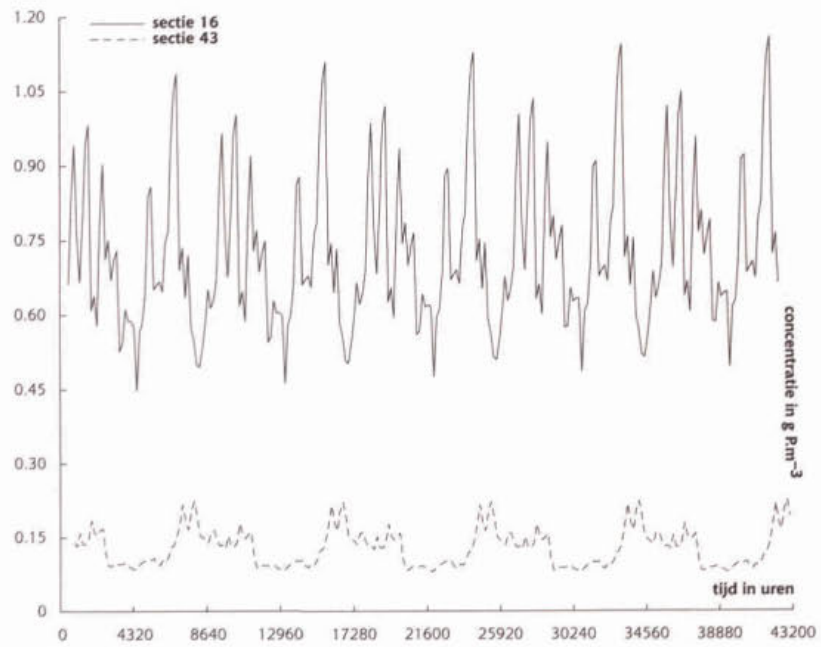
Figuur 8.5

Chlorofylgehalte in sectie 16 en 43 in $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$.

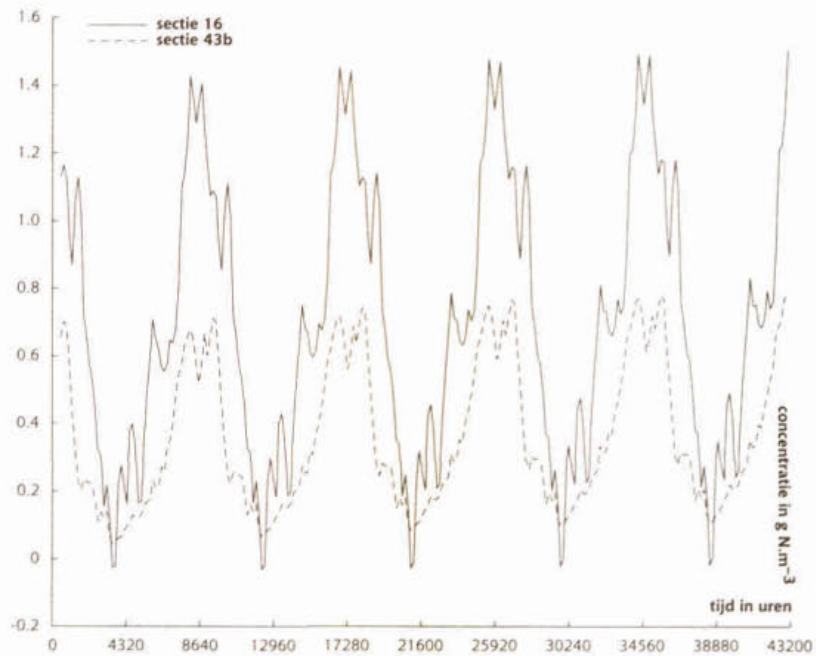


Figuur 8.6

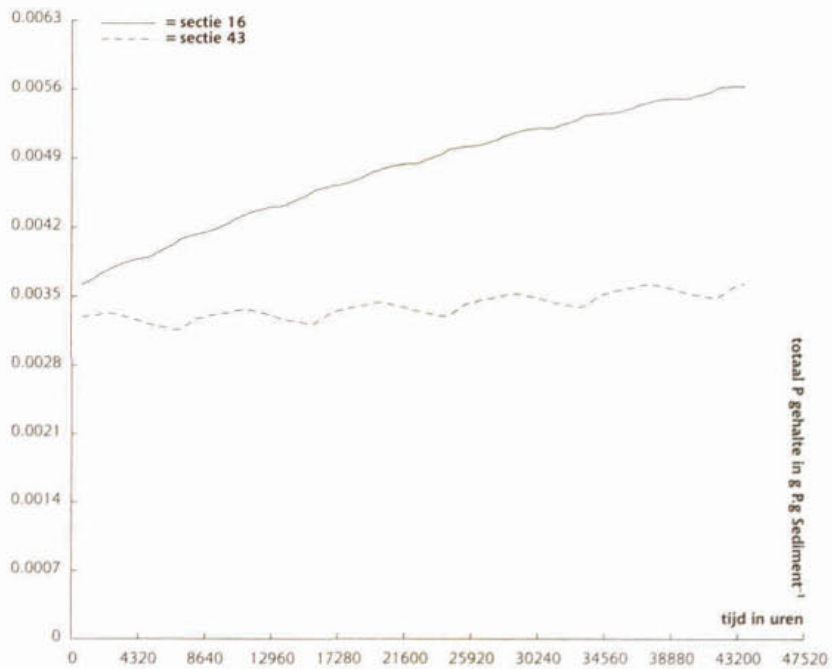
Concentratie aan totaal anorganisch fosfaat TIPW in de waterkolom in sectie 16 en 43.



Figuur 8.7 Concentratie aan ammonium in de waterkolom in sectie 16 en 43.



Figuur 8.8 Gehaltes aan totaal P in de sediment toplaag in sectie 16 en 43 in $\text{g P g Sediment}^{-1}$.



Literatuur

Brown, G.L. et al., 1985, Rates, Constants and Kinetics. Formulations in Surface Water Quality Modeling, 2nd edition, Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Athens, Georgia

Portielje, R., 1992, Response of Shallow Aquatic Ecosystems to Different Nutrient Loading Levels, dissertatie 1845 Landbouw Universiteit Wageningen, Wageningen

Van Duin, E.H.S., 1992, Sediment Transport, Light and Algal Growth in the Markermeer, dissertatie 1561 Landbouw Universiteit Wageningen, Wageningen

Procesbeschrijvingen model EUTROF2A (EUTROF2A.MOD)

/* */
 /* MODEL EUTROF2A */
 /* Model voor N/P huishouding en algengroei en sediment/water uitwisseling */
 /* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
 /* */
 /* Landbouwniversiteit Wageningen */
 /* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
 /* Postbus 8080 */
 /* 6700 DD Wageningen */
 /* */

water	A1	[1.000]	g-C/m3	:biomassa alg 1
water	A2	[1.000]	g-C/m3	:biomassa alg 2
water	A3	[1.000]	g-C/m3	:biomassa alg 3
water	NH4W	[0.800]	g-N/m3	:ammonium N waterkolom
water	NO3W	[3.00]	g-N/m3	:nitraat N waterkolom
water	TIPW	[0.05]	g-P/m3	:anorganische P waterkolom
water	TONW	[0.300]	g-N/m3	:organisch N waterkolom
water	TOPW	[0.025]	g-P/m3	:organisch P waterkolom
water	SSw	[10.00]	g/m3	:zwevende stof waterkolom
bottom	AB	[0.000]	g-C/m3	:totaal algen biomassa sediment
bottom	NH4B	[1.00]	g-N/m3	:ammonium N sedimenttoplaag
bottom	NH41B	[1.00]	g-N/m3	:ammonium N sedimentonderlaag
bottom	NO3B	[3.000]	g-N/m3	:nitraat N sedimenttoplaag
bottom	NO31B	[0.000]	g-N/m3	:nitraat N sedimentonderlaag
bottom	TIPB	[0.10]	g-P/m3	:anorganisch P sedimenttoplaag
bottom	TIPLB	[0.05]	g-P/m3	:anorganisch P sedimentonderlaag
bottom	TONB	[1.00]	g-N/m3	:organisch N sedimenttoplaag
bottom	TONLB	[1.00]	g-N/m3	:organisch N sedimentonderlaag
bottom	TOPB	[0.10]	g-P/m3	:organisch P sedimenttoplaag
bottom	TOPLB	[0.01]	g-P/m3	:organisch P sedimentonderlaag
parm	achlc1	[30.000]	g Chl/mg C	:chlorofyl koolstof verhouding alg 1
parm	achlc2	[30.000]	g Chl/mg C	:chlorofyl koolstof verhouding alg 2
parm	achlc3	[30.000]	g Chl/mg C	:chlorofyl koolstof verhouding alg 3
parm	anc	[0.15]	mg N/mg C	:N koolstof verhouding algen en detritus
parm	apc	[0.010]	mg P/mg C	:P koolstof verhouding algen en detritus
parm	DZ	[0.1]	m	:dikte van de sedimenttoplaag
parm	e0	[1.000]	1/m	:achtergrond extinctie
parm	ealg	[0.016]	ug Chl/l.m	:specifieke extinctie algen
parm	eSS	[0.050]	mg SS/l.m	:specifieke extinctie zwevende stof
parm	EZ	[0.00005]	m2/dag	:mechanische dispersie water sediment
parm	fdNOB	[0.00]	-	:fractie opgelost org-N sediment
parm	fdNOW	[0.00]	-	:fractie opgelost org-N waterkolom
parm	fdPOB	[0.00]	-	:fractie opgelost org-P sediment
parm	fdPOW	[0.00]	-	:fractie opgelost org-P waterkolom
parm	fnorg	[0.80]	-	:fractie org-N die vrijkomt bij respiratie
parm	FOSB	[0.25]	-	:fractie organische stof in het sediment
parm	fporg	[0.80]	-	:fractie org-P die vrijkomt bij respiratie
parm	Is1	[120.00]	W/m2	:optimale lichtintensiteit alg 1
parm	Is2	[120.00]	W/m2	:optimale lichtintensiteit alg 2
parm	Is3	[120.00]	W/m2	:optimale lichtintensiteit alg 3
parm	KDAb	[0.000167]	1/dag	:anaerobe afbraaksnelheid algen in sediment
parm	KdenB	[0.050]	1/dag	:denitrificatiesnelheid sediment
parm	kdie1	[0.200]	1/dag	:afsterfsnelheid alg 1
parm	kdie2	[0.200]	1/dag	:afsterfsnelheid alg 2
parm	kdie3	[0.200]	1/dag	:afsterfsnelheid alg 3
parm	Kdno	[0.500]	g-N/m3	:O2 monod constante denitrificatie
parm	Kmin	[0.0400]	1/dag	:decompositiesnelheid organische stof waterkolom
parm	Kminb	[0.0010]	1/dag	:decompositiesnelheid organische stof sediment
parm	Kn1	[0.010]	g-N/m3	:monod constante N alg 1

parm	Kn2	[0.010]	g-N/m3	:monod constante N alg 2
parm	Kn3	[0.010]	g-N/m3	:monod constante N alg 3
parm	Knit	[0.4500]	1/dag	:nitrificatie snelheid waterkolom
parm	Kno	[0.100]	mg-O2/m3	:O2 monod constante nitrificatie
parm	Kp1	[0.005]	g-P/m3	:monod constante P alg 1
parm	Kp2	[0.005]	g-P/m3	:monod constante P alg 2
parm	Kp3	[0.005]	g-P/m3	:monod constante P alg 3
parm	KpIPb	[0.0002]	m3/g SS	:partitie constante P sediment
parm	KpIPw	[0.01]	m3/g SS	:partitie constante P waterkolom
parm	Kres1	[0.100]	1/dag	:respiratiesnelheid alg 1
parm	Kres2	[0.100]	1/dag	:respiratiesnelheid alg 2
parm	Kres3	[0.100]	1/dag	:respiratiesnelheid alg 3
parm	Pnh4	[1.0000]	-	:ammoniumpreferentie factor
parm	POR	[0.80]	-	:porositeit sediment
parm	RHOANO	[2600.0]	kg/m3	:dichtheid anorganische stof
parm	RHOORG	[1000.0]	kg/m3	:dichtheid organische stof
parm	TDAB	[1.040]	-	:temperatuur coëff. afbraak algen sediment
parm	TDENB	[1.040]	-	:temperatuur coëff. denitrificatie sediment
parm	TGA1	[1.040]	-	:temperatuur coëff. groei alg 1
parm	TGA2	[1.040]	-	:temperatuur coëff. groei alg 2
parm	TGA3	[1.040]	-	:temperatuur coëff. groei alg 3
parm	TMIN	[1.0400]	-	:temperatuur coëff. decompositie waterkolom
parm	TMINB	[1.080]	-	:temperatuur coëff. decompositie sediment
parm	TNiT	[1.080]	-	:temperatuur coëff. nitrificatie
parm	TRA1	[1.040]	-	:temperatuur coëff. respiratie alg 1
parm	TRA2	[1.040]	-	:temperatuur coëff. respiratie alg 2
parm	TRA3	[1.040]	-	:temperatuur coëff. respiratie alg 3
parm	Umax1	[1.750]	1/dag	:maximale groeisnelheid alg1
parm	Umax2	[1.750]	1/dag	:maximale groeisnelheid alg2
parm	Umax3	[1.750]	1/dag	:maximale groeisnelheid alg3
parm	VsA1	[0.150]	m/dag	:sedimentatiesnelheid alg 1
parm	VsA2	[0.150]	m/dag	:sedimentatiesnelheid alg 2
parm	VsA3	[0.150]	m/dag	:sedimentatiesnelheid alg 3
parm	Vsn	[0.250]	m/dag	:sedimentatiesnelheid organisch N en P
parm	Vss	[2.00]	m/dag	:sedimentatiesnelheid zwevende stof
xt	Fres	[20.00]	g/m2,dag	:resuspensie flux
xt	Ia	[100.00]	W/m2	:daggemiddelde lichtintensiteit
xt	L	[12.000]	hour	:daglengte
xt	T	[20.0]	oc	:temperatuur
flow	Z	[1.00]	m	:diepte

{
EZ2=0.00001 + EZ*EXP(-50*DZ);

mino = $K_{min} * t_{min}^{(T-20)}$;
minoB = $K_{minB} * t_{minB}^{(T-20)}$;
minaB = $K_{daB} * t_{daB}^{(T-20)}$;

RHO = $1 / ((FOSB/RHOORG) + ((1-FOSB)/RHOANO))$;
k1(SSw) = $-V_{ss}/Z$;
k0(SSw) = F_{res}/Z ;
SSb = $RHO * 1000 * (1-POR)$;
Fsed = $V_{ss} * SSw$;
Vs = $F_{sed} / (RHO * (1-POR) * 1000)$;
Vr = $F_{res} / (RHO * (1-POR) * 1000)$;
Vsd = $V_s - V_r$;

Chla = $achlc1 * A1 + achlc2 * A2 + achlc3 * A3$;
etot = $e0 + ealg * Chla + eSS * SSw$;
alfa01 = $Ia / Is1$;
alfa11 = $alfa01 * \exp(-1 * etot * z)$;
alfa02 = $Ia / Is2$;
alfa12 = $alfa02 * \exp(-1 * etot * z)$;
alfa03 = $Ia / Is3$;
alfa13 = $alfa03 * \exp(-1 * etot * z)$;
f = $L/24$;

$f1 = 2.718 * f * (\exp(-1 * \text{alfa}11) - \exp(-1 * \text{alfa}01)) / (\text{etot} * z);$
 $f2 = 2.718 * f * (\exp(-1 * \text{alfa}12) - \exp(-1 * \text{alfa}02)) / (\text{etot} * z);$
 $f3 = 2.718 * f * (\exp(-1 * \text{alfa}13) - \exp(-1 * \text{alfa}03)) / (\text{etot} * z);$
 $ft1 = \text{tga}1 \wedge (t-20);$
 $ft2 = \text{tga}2 \wedge (t-20);$
 $ft3 = \text{tga}3 \wedge (t-20);$

$\text{DINW} = \text{NO}3\text{W} + \text{NH}4\text{W};$
 $\text{fdpW} = 1 / (1 + \text{KpipW} * \text{SSw});$
 $\text{DIPW} = \text{fdpW} * \text{TIPW};$
 $\text{fn}1 = \min(\text{DIPW} / (\text{DIPW} + \text{kp}1), \text{DINW} / (\text{DINW} + \text{kn}1));$
 $\text{fn}2 = \min(\text{DIPW} / (\text{DIPW} + \text{kp}2), \text{DINW} / (\text{DINW} + \text{kn}2));$
 $\text{fn}3 = \min(\text{DIPW} / (\text{DIPW} + \text{kp}3), \text{DINW} / (\text{DINW} + \text{kn}3));$
 $\text{Gr}1 = \text{Umax}1 * \text{fn}1 * \text{ft}1 * \text{fn}1;$
 $\text{Gr}2 = \text{Umax}2 * \text{fn}2 * \text{ft}2 * \text{fn}2;$
 $\text{Gr}3 = \text{Umax}3 * \text{fn}3 * \text{ft}3 * \text{fn}3;$
 $\text{GrT} = \text{Gr}1 * \text{A}1 + \text{Gr}2 * \text{A}2 + \text{Gr}3 * \text{A}3;$
 $\text{Resp}1 = \text{kdie}1 + \text{kres}1 * \text{tra}1 \wedge (T-20);$
 $\text{Resp}2 = \text{kdie}2 + \text{kres}2 * \text{tra}2 \wedge (T-20);$
 $\text{Resp}3 = \text{kdie}3 + \text{kres}3 * \text{tra}3 \wedge (T-20);$
 $\text{RespT} = \text{Resp}1 * \text{A}1 + \text{Resp}2 * \text{A}2 + \text{Resp}3 * \text{A}3;$
 $\text{Loss}1 = \text{Resp}1 + \text{VsA}1 / z;$
 $\text{Loss}2 = \text{Resp}2 + \text{VsA}2 / z;$
 $\text{Loss}3 = \text{Resp}3 + \text{VsA}2 / z;$
 $\text{k}1(\text{A}1) = \text{Gr}1 - \text{Loss}1;$
 $\text{k}1(\text{A}2) = \text{Gr}2 - \text{Loss}2;$
 $\text{k}1(\text{A}3) = \text{Gr}3 - \text{Loss}3;$

$\text{k}1(\text{AB}) = -\text{minaB};$
 $\text{k}0(\text{AB}) = (\text{VsA}1 * \text{A}1 + \text{VsA}2 * \text{A}2 + \text{VsA}3 * \text{A}3) / \text{DZ};$

$\text{fdpB} = 1 / (1 + \text{KpipB} * \text{SSb});$
 $\text{DIPPB} = \text{fdpB} * \text{TIPPB} / \text{POR};$
 $\text{DIPLB} = \text{fdpB} * \text{TIPLB} / \text{POR};$
 $\text{PIPW} = (1 - \text{fdpW}) * \text{TIPW} / \text{SSw};$
 $\text{PIPB} = (1 - \text{fdpB}) * \text{TIPPB} / \text{SSb};$
 $\text{FipD} = \text{Ez} * (\text{DIPPB} - \text{DIPW}) / (0.5 * \text{DZ});$
 $\text{FipDL} = \text{Ez} * (\text{DIPLB} - \text{DIPW}) / (0.5 * \text{DZ});$
 $\text{FipS} = \text{Fsed} * \text{PIPW} + \text{Vs} * \text{POR} * \text{DIPW};$
 $\text{FipR} = \text{Fres} * \text{PIPB} + \text{Vr} * \text{POR} * \text{DIPPB};$
 $\text{FipB} = -\text{Vsd} * \text{TIPPB};$
 If ($\text{Vsd} < 0.0$)
 {
 $\text{FipB} = +\text{Vsd} * \text{TIPLB};$
 }
 $\text{FipWmin} = \text{mino} * \text{TOPW} * \text{Z};$
 $\text{FipWgr} = -\text{GrT} * \text{apc} * \text{Z};$
 $\text{FipWrsp} = \text{RespT} * \text{apc} * (1 - \text{fporg}) * \text{Z};$
 $\text{FipBmin} = \text{minoB} * \text{TOPW} * \text{DZ};$
 $\text{k}0(\text{TIPW}) = \text{mino} * \text{TOPW} - \text{GrT} * \text{apc} + \text{RespT} * \text{apc} * (1 - \text{fporg}) + (\text{FipD} - \text{FipS} + \text{FipR}) / \text{Z};$
 $\text{k}0(\text{TIPPB}) = \text{minoB} * \text{TOPPB} + (-\text{FipD} - \text{FipDL} + \text{FipS} - \text{FipR} + \text{FipB}) / \text{DZ};$

$\text{NH}4\text{I} = \text{NH}4\text{B} / \text{POR};$
 $\text{Fnh}4\text{D} = \text{Ez} * (\text{NH}4\text{I} - \text{NH}4\text{W}) / (0.5 * \text{DZ});$
 $\text{Fnh}4\text{DL} = \text{Ez} * (\text{NH}4\text{I} - \text{NH}4\text{LB}) / (0.5 * \text{DZ});$
 $\text{Fnh}4\text{S} = \text{Vs} * \text{POR} * \text{NH}4\text{W};$
 $\text{Fnh}4\text{R} = \text{Vr} * \text{POR} * \text{NH}4\text{I};$
 $\text{Fnh}4\text{B} = -\text{Vsd} * \text{NH}4\text{B};$
 If ($\text{Vsd} < 0.0$)
 {
 $\text{Fnh}4\text{B} = +\text{Vsd} * \text{NH}4\text{LB};$
 }
 $\text{Nitr} = \text{Knit} * \text{tnit} \wedge (T-20);$
 $\text{k}1(\text{NH}4\text{W}) = -\text{Nitr};$
 $\text{k}0(\text{NH}4\text{W}) = \text{mino} * \text{TONW} - \text{anc} * \text{Pnh}4 * \text{GrT} + (1 - \text{fnorg}) * \text{anc} * \text{RespT} + (\text{Fnh}4\text{D} - \text{Fnh}4\text{S} + \text{Fnh}4\text{R}) / \text{Z};$
 $\text{k}1(\text{NH}4\text{B}) = 0;$
 $\text{k}0(\text{NH}4\text{B}) = \text{minoB} * \text{TONB} + (-\text{Fnh}4\text{D} - \text{Fnh}4\text{DL} + \text{Fnh}4\text{S} - \text{Fnh}4\text{R} + \text{Fnh}4\text{B}) / \text{DZ};$

$FNH4Wnit = -NH4w * Nitr * Z;$
 $FNH4Wmin = mino * TONW * Z;$
 $FNH4Bmin = minoB * TONB * DZ;$
 $FNH4Wgr = -GrT * anc * Pnh4 * Z;$
 $FNH4Wrsp = RespT * anc * (1 - fnorg) * Z;$

$NO3I = NO3B / POR;$
 $Fno3D = Ez * (NO3I - NO3W) / (0.5 * DZ);$
 $Fno3DL = Ez2 * (NO3I - NO3LB) / (0.5 * DZ);$
 $Fno3S = Vs * POR * NO3W;$
 $Fno3R = Vr * POR * NO3I;$
 $Fno3B = -Vsd * NO3B;$
 If (Vsd < 0.0)
 {
 $Fno3B = +Vsd * NO3LB;$
 }
 $denitB = KdenB * tdenB ^ (T-20);$
 $k0(NO3W) = nitr * NH4W - anc * (1 - pnh4) * GrT + (Fno3D - Fno3S + Fno3R) / Z;$
 $k1(NO3B) = -denitB;$
 $k0(NO3B) = (-Fno3D - Fno3DL + Fno3S - Fno3R + Fno3B) / DZ;$

$FNO3Wnit = NH4w * Nitr * Z;$
 $FNO3Bden = -denitB * NO3B * DZ;$
 $FNO3Wgr = -GrT * anc * (1 - pnh4) * Z;$

$DOPW = fdpoW * TOPW;$
 $DOPPB = fdPoB * TOPPB / POR;$
 $DOPLB = fdpoB * TOPLB / POR;$
 $POPW = (1 - fdpoW) * TOPW / SSw;$
 $POPb = (1 - fdpoB) * TOPPB / SSb;$
 $FopD = Ez * (DOPPB - DOPW) / (0.5 * DZ);$
 $FopDL = Ez2 * (DOPPB - DOPLB) / (0.5 * DZ);$
 $FopS = Fsed * POPW + Vs * POR * DOPW;$
 $FopR = Fres * POPb + Vr * POR * DOPPB;$
 $FopB = -Vsd * TOPPB;$
 If (Vsd < 0.0)
 {
 $FopB = +Vsd * TOPLB;$
 }
 $k1(TOPW) = -mino;$
 $k0(TOPW) = fporg * RespT * apc + (FopD - FopS + FopR) / Z;$
 $k1(TOPPB) = -minoB;$
 $k0(TOPPB) = apc * minaB * AB + (-FopD - FopDL + FopS - FopR + FopB) / DZ;$

$FTOPWmin = -mino * TOPW * Z;$
 $FTOPPBmin = -minoB * TOPPB * DZ;$
 $FTOPPBalg = -apc * minaB * AB * DZ;$
 $FTOPWrsp = RespT * apc * fporg * Z;$

$DONW = fdnoW * TONW;$
 $DONB = fdnoB * TONB / POR;$
 $DONLB = fdnoB * TONLB / POR;$
 $PONW = (1 - fdnoW) * TONW / SSw;$
 $PONB = (1 - fdnoB) * TONB / SSb;$
 $FonD = Ez * (DONB - DONW) / (0.5 * DZ);$
 $FonDL = Ez2 * (DONB - DONLB) / (0.5 * DZ);$
 $FonS = Fsed * PONW + Vs * POR * DONW;$
 $FonR = Fres * PONB + Vr * POR * DONB;$
 $FonB = -Vsd * TONB;$
 If (Vsd < 0.0)
 {
 $FonB = +Vsd * TONLB;$
 }
 $k1(TONW) = -mino;$
 $k0(TONW) = fnorg * RespT * anc + (FonD - FonS + FonR) / Z;$
 $k1(TONB) = -minoB;$
 $k0(TONB) = anc * minaB * AB + (-FonD - FonDL + FonS - FonR + FonB) / DZ;$

$FTONW_{min} = -mino * TONW * Z;$
 $FTONB_{min} = -minoB * TONB * DZ;$
 $FTONW_{rsp} = RespT * anc * fnorg * Z;$
 $FTONB_{alg} = -anc * minaB * AB * DZ;$

$P_{totW} = apc * (A1 + A2 + A3) + TOPW + TIPW;$
 $KJN = anc * (A1 + A2 + A3) + TONW + NH4W;$
 $N_{totW} = KJN + NO3W;$
 $P_{totB} = (tipb + topb) / SSB;$
 $N_{totB} = tonb / SSB; \}$

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Model PUT

simulatie van fosfaat- en lichtgelimiteerde
algen groei in een gestratificeerd systeem

augustus 1997

hoofdstuk

9

R.H. Aalderink

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

9

Inhoudsopgave

9.1 Model PUT 5

9.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen 5

9.2 Procesbeschrijvingen 6

9.2.1 Modelvergelijkingen 6

9.3 Benodigde invoer 12

9.3.1 Initiële condities 12

9.3.2 Randvoorwaarden 14

9.3.3 Parameters 14

9.3.4 Externe variabelen 15

9.4 Uitvoer 16

9.5 Voorbeeld 16

9.5.1 Situatieschets 16

9.5.2 DufLOW invoer 17

9.5.3 Resultaten 18

Literatuur 20

Bijlagen

Bijlage 1 Procesbeschrijvingen PUT (PUT.MOD) 21

9.1 Model PUT

Het model PUT is ontwikkeld in samenwerking met Haskoning voor een haalbaarheidsstudie naar de bestrijding van *Oscillatoria Rubescens* en *Oscillatoria Creatum* in de gestratificeerde zandwinplas De Kuil bij Breda. Ten grondslag aan het model PUT liggen de vergelijkingen van EUTROF2, omdat dit model zowel de groei van drie algensoorten als het transport van nutriënten simuleert. Bij EUTROF2 ontbreken echter wel de beschrijving van de stratificatie en de daardoor geïntroduceerde condities. In het PUT model is de beschrijving van de stratificatie aan EUTROF2 toegevoegd.

9.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen

De voornaamste toepassing van het model ligt in de beschrijving van algengroei in gestratificeerde plassen, waarbij veelal het effect van de zich wijzigende menging over de verticaal zal worden onderzocht. Figuur 9.1 op pagina 6 laat zien hoe het model-systeem in de verticaal wordt beschreven.

Allereerst is de gesimuleerde waterkolom onderverdeeld in een boven- en onderlaag. Deze lagen komen overeen met het epilimnion en het hypolimnion. Menging tussen de beide waterlagen is beschreven met een uitwisselingsdebiet. Dit debiet heeft meestal een vaste waarde, maar dit debiet kan als functie van de tijd worden gegeven, waardoor de menging tussen beide waterlagen een dynamisch karakter krijgt.

Tenslotte is ook de sedimentlaag opgesplitst in een toplaag en een onderlaag. Stoffen in de onderste sedimentlaag worden in het model als immobiel beschouwd en zijn niet door diffusie of uitwisselingsdebieten beschikbaar voor de bovenliggende sedimentlaag. De toplaag daarentegen wisselt fosfaat uit met de onderste sedimentlaag en het hypolimnion. Deze laatste uitwisseling van stoffen tussen het sediment en het bovenstaande water wordt in het model dynamisch berekend.

Voor de drie lagen boven de onderste sedimentlaag kan een verschillende partitiecöëfficiënt worden opgegeven. Op deze wijze kan het verschil in adsorptie capaciteit onder aërobe en anaërobe condities in rekening worden gebracht. Ook kan rekening worden gehouden met verschillen in mineralisatiesnelheid van organisch gebonden fosfaat in sediment en water.

De volgende beperkende aannamen zijn in dit model gemaakt:

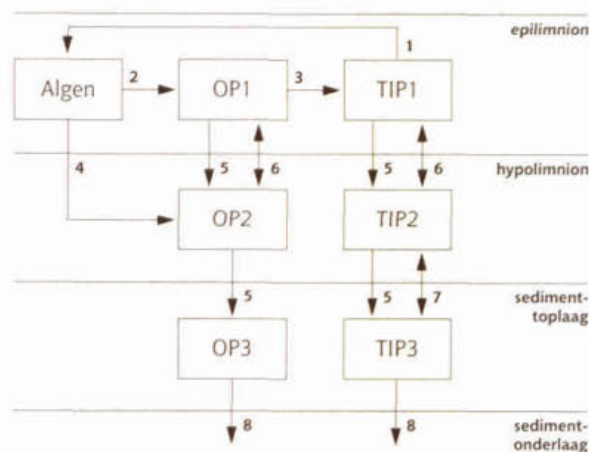
1. Zowel het epilimnion als het hypolimnion zijn ideaal gemengd;
2. De stratificatie wordt niet in het model uitgerekend en is verplaatsbaar gedurende de simulatieperiode;
3. Er wordt een actieve toplaag met constante dikte verondersteld;
4. Nalevering van fosfaat vindt alleen plaats door diffusieve uitwisseling van de opgelost fractie;
5. Adsorptie en desorptie van fosfaat aan zwevende stof wordt in zowel de waterkolom als in het sediment beschreven met lineaire partitie;
6. In het model wordt geen onderscheid gemaakt tussen opgelost en particulier organisch gebonden fosfaat;
7. Resuspensie wordt niet in het model beschreven;
8. Het zwevende stofgehalte is gebruikt om het adsorptie/desorptie evenwicht te bepalen;

9. Groei van algen vindt alleen plaats in het epilimnion. Er wordt gerekend met een over de diepte gemiddelde groeisnelheid. Hieruit volgen impliciet twee aannamen. Allereerst de aanname, dat de tijdschaal van adaptatie veel groter is dan de tijdschaal van menging en ten tweede de aanname, dat algen niet actief migreren over de verticaal;

9.2 Procesbeschrijvingen

Figuur 9.1 geeft een schematisch overzicht van de in het model onderscheiden toestandsvariabelen en hun onderlinge relaties.

Figuur 9.1 Overzicht van de toestandsvariabelen en hun onderlinge relaties.



[1] Opname van fosfaat door algen; [2] vrijkomen van organisch fosfaat bij algenverliezen; [3] mineralisatie van organisch gebonden fosfaat; [4] sedimentatie van algen; [5] sedimentatie van organisch en anorganische fosfaat; [6] uitwisseling tussen epilimnion en hypolimnion; [7] uitwisseling van opgelost fosfaat tussen sediment en water; [8] pseudo-advectief transport.

9.2.1 Modelvergelijkingen

Alleen de zogenaamde kinetische afgeleiden worden hier beschreven. Dus niet de termen die het horizontaal transport beschrijven. Deze worden standaard door DUFLOW berekend.

SEDIMENT-WATER UITWISSELING

Sediment-water uitwisseling van opgeloste stof vindt plaats door diffusie. Er vindt diffusief transport plaats over het grensvlak sediment-water en tussen de sediment-toplaag en de sedimentonderlaag. De concentraties van alle stoffen in de sediment-onderlaag worden constant verondersteld en worden door de gebruiker opgegeven.

In de stofbalansen wordt de diffusieve uitwisseling beschreven met een uitwisselingsconstante. Er wordt onderscheid gemaakt tussen een achtergrond diffusie en een mechanische diffusie ten gevolge van door golven geïnduceerde drukverschillen in het

sediment. Aangenomen wordt dat de bijdrage van de mechanische diffusie exponentieel afneemt, naarmate de afstand tot het sedimentoppervlak toeneemt. Hiertoe worden dezelfde vergelijkingen gebruikt als in EUTROF2A (zie hoofdstuk 8).

$$[1] \quad K_{dif} = \frac{(0.00001 + E_{dif})}{0.5 \cdot HB}$$

$$[2] \quad K_{dif,2} = \frac{(0.00001 + E_{dif} \cdot e^{-k_{edif} \cdot HB})}{0.5 \cdot HB}$$

waarin: K_{dif} de uitwisselingsconstante grensvlak water-sediment toplaag (m.dag⁻¹)
 $K_{dif,2}$ de uitwisselingsconstante grensvlak sediment top- en onderlaag (m.dag⁻¹)
 E_{dif} de diffusieconstante voor mechanische diffusie (m².dag⁻¹)
 k_{edif} de constante voor de afname van de mechanische diffusie in het sediment (m⁻¹)
 HB de dikte van de actieve sedimenttoplaag (m)

UITWISSELING TUSSEN DE BOVEN- EN ONDERLAAG IN DE WATERKOLOM

De uitwisseling tussen boven- en onderlaag wordt beschreven met een uitwisselingconstante. Met betrekking tot de waterkolom duiden de indexcijfers 1 en 2 op respectievelijk de bovenste en onderste waterlaag. De uitwisselingsconstante wordt berekend met:

$$[3] \quad K_{ex,1} = \frac{Q_{ex}}{V_1}$$

$$[4] \quad K_{ex,2} = \frac{Q_{ex}}{V_2}$$

waarin: $K_{ex,i}$ de uitwisselingsconstante voor de boven- en onderlaag (dag⁻¹)
 Q_{ex} de door de gebruiker op te geven uitwisselingsdebiet tussen boven-en onderlaag (m³.dag⁻¹)
 V_i het volume (m³)

Het volume van de bovenlaag is variabel en wordt door het waterbewegingsmodel berekend. Daarentegen is het volume van de onderlaag constant verondersteld. Het volume van de onderlaag wordt berekend uit de door de gebruiker opgegeven diepte van de onderlaag en het uitwisselend oppervlak. Dit laatste wordt bepaald als:

$$[5] \quad Opp = \frac{V_1}{H_1}$$

waarin: Opp het uitwisselingsoppervlak tussen beide waterlagen (m²)
 V_1 het volume van de bovenste waterlaag (m³)
 H_1 de waterdiepte van de bovenste waterlaag(m)

ZWEVENDE STOF

De balansen voor zwevende stof in boven- en onderlaag worden gegeven door:

$$[6] \quad \frac{dSSW_1}{dt} = \frac{V_{SS}}{H_1} \cdot SSW_1 + K_{ex,1} \cdot (SSW_2 - SSW_1)$$

$$[7] \quad \frac{dSSW_2}{dt} = \frac{V_{SS}}{H_2} \cdot SSW_2 + \frac{V_{SS}}{H_2} \cdot SSW_1 + K_{ex,2} \cdot (SSW_1 - SSW_2)$$

waarin: V_{SS} de sedimentatiesnelheid van de zwevende stof ($m \cdot dag^{-1}$)
 SSW_i de zwevende stofconcentratie in boven- en onderlaag ($g \cdot m^{-3}$)
 H_1 de waterdiepte van de bovenste waterlaag (m)
 H_2 de waterdiepte van de onderste waterlaag (m)

De vaste stofconcentratie in de sedimenttoplaag wordt berekend uit de dichtheid en de porositeit volgens:

$$[8] \quad SS_B = 1000 \cdot \rho \cdot (1 - POR)$$

waarin: SS_B de vaste stofconcentratie van de sedimenttoplaag ($kg \cdot m^{-3}$)
 POR de porositeit van het sediment (-)
 ρ de dichtheid van het sediment ($kg \cdot m^{-3}$)

De vergelijking hierboven gebruikt de grootte sedimentdichtheid. In het model PUT volgt deze sedimentdichtheid uit de dichtheden van de organische en anorganische stoffracties. Voor de berekening van de sedimentdichtheid wordt de organische stof fractie als een constante ingevoerd.

$$[9] \quad \rho = f_{org} \cdot \rho_{org} + (1 - f_{org}) \cdot \rho_{ano}$$

waarin: f_{org} de fractie organische stof van het sediment (-)
 ρ_{org} de dichtheid organische stof ($kg \cdot m^{-3}$)
 ρ_{ano} de dichtheid anorganische stof ($kg \cdot m^{-3}$)

Het pseudo-advectief transport vanuit de sedimenttoplaag wordt berekend uit de sedimentatieflux in de onderste waterlaag volgens:

$$[10] \quad V_{psad} = \frac{F_{sed,2}}{1000 \cdot \rho \cdot (1 - POR)}$$

waarbij de sedimentatieflux ($g \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$) wordt gegeven door:

$$[11] \quad F_{sed,2} = V_{SS} \cdot SSW_2$$

ALGENGROEI

Voor de groei van algen is verondersteld, dat deze alleen plaatsvindt in de bovenlaag van de waterkolom. Anders dan het EUTROF2A model uit hoofdstuk 8 wordt in dit model slechts één algensoort beschreven. De populatiegroei van deze algensoort wordt gelimiteerd door licht, temperatuur en het nutriënt fosfaat. Limitatie door stik-

stofnutriënten is dus buiten beschouwing gelaten. Verder is aangenomen, dat de algen niet migreren over de spronglaag, tenzij de algen onderhevig zijn aan sedimentatie.

$$[12] \quad \frac{dA}{dT} = \mu_{\max,20} \cdot F_T \cdot F_L \cdot F_P \cdot A - K_{IA} \cdot A - \frac{V_{sA}}{H_1} A$$

waarin:

- A de algenbiomassa (mg C.l^{-1})
- $\mu_{\max,20}$ de maximale ongelimiteerde groeisnelheid (dag^{-1})
- F_L de diepte gemiddelde lichtlimitatie factor (-)
- F_T de temperatuur limitatie factor (-)
- F_P de fosfaat limitatie factor (-)
- K_{IA} de totale verliessnelheid (dag^{-1})
- V_{sA} de sedimentatiesnelheid van de algen (m.dag^{-1})
- H_1 de diepte van de toplaag (m)

K_{IA} beschrijft in deze formule de totale verliezen aan algenbiomassa door respiratie, afsterving en graas. Het verlies door sedimentatie wordt apart in rekening gebracht. De door sedimentatie in de onderlaag terecht gekomen algen worden beschouwd als dood organisch materiaal.

De temperatuurafhankelijkheid van de algengroei is beschreven door:

$$[13] \quad F_T = \theta_{ga}^{(T-20)}$$

waarin:

- θ_{ga} de temperatuurconstante (-)
- T de temperatuur ($^{\circ}\text{C}$)

De watertemperatuur kan in het model als functie van de tijd worden opgegeven. Een onderscheid in temperatuur wordt gemaakt tussen de boven- en onderlaag.

Limitatie door nutriënten wordt beschreven met een Monod-vergelijking:

$$[14] \quad F_P = \frac{DIP_1}{K_P + DIP_1}$$

waarin:

- DIP_1 de opgelost fosfaat concentratie (g P.m^{-3})
- K_P de Monod-konstante voor fosfaat (g P.m^{-3})

Lichtlimitatie wordt berekend volgens de hieronderstaande Steele-vergelijking. Deze vergelijking is zowel over de diepte als over de dag gemiddeld.

$$[15] \quad F_L = \frac{e \cdot f}{\epsilon_{\text{tot}} \cdot H_1} \cdot [e^{-\alpha_1} - e^{-\alpha_0}]$$

met:

$$[16] \quad \alpha_0 = \frac{I_a}{I_{\text{opt}}}$$

en:

$$[17] \quad \alpha_1 = \alpha_0 \cdot e^{-\epsilon_{\text{tot}} \cdot H_1}$$

waarin: I_a de daggemiddelde instraling aan het wateroppervlak over de daglichtperiode ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$)
 I_{opt} de optimale lichtintensiteit ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$)
 f de fractie van de dag dat het licht is (-). Er geldt $f=L/24$.
 ϵ_{tot} de totale extinctie coëfficiënt (m^{-1})

De totale extinctie wordt bepaald door een constante achtergrondextinctie en een bijdrage van de algen:

$$[18] \quad \epsilon_{\text{tot}} = \epsilon_0 + \alpha \cdot a_{\text{chl}c} \cdot A$$

waarin: ϵ_0 de achtergrondextinctie (m^{-1})
 α de specifieke extinctie voor chlorofyl ($\text{l}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{mg Chl}^{-1}$)
 $a_{\text{chl}c}$ de koolstof/chlorofyl verhouding ($\text{mg Chl}\cdot\text{g C}^{-1}$)

ORGANISCH GEBONDEN FOSFAAT

Het organisch gebonden fosfaat (OP) representeert het fosfaat in dood organisch materiaal (detritus). Doordat in dit model geen onderscheid wordt gemaakt tussen een opgeloste en een particulaire fractie, is verondersteld dat opgelost organisch fosfaat onderhevig is aan sedimentatie.

Organisch fosfaat ontstaat door biomassaverliezen door respiratie, graas en sterfte. Mineralisatie zet organisch fosfaat om in opgelost anorganisch fosfaat (DIP). Hierbij kunnen drie mineralisatiesnelheden worden onderscheiden. Eén die geldt onder aërobe condities en twee die representatief zijn voor de anaërobe omstandigheden in de onderste waterlaag en in de bovenste sedimentlaag. Aangetekend moet worden dat de temperatuur van het bodensediment gelijk wordt gesteld aan de temperatuur van de onderste waterlaag. In het model PUT wordt geen onderscheid gemaakt tussen allochtoon en autochtoon dood organisch materiaal.

De vergelijking voor organisch fosfaat in de onderscheiden lagen, wordt gegeven door:

$$[19] \quad \frac{dOP_1}{dt} = a_{PC} \cdot K_{IA} \cdot \theta_{ra}^{(T_1-20)} \cdot A - \text{Min}_1 \cdot OP_1 - \frac{v_{SO} \cdot OP_1}{H_1} + K_{ex,1} \cdot (OP_2 - OP_1)$$

$$[20] \quad \frac{dOP_2}{dt} = -\text{Min}_2 \cdot OP_2 + \frac{a_{PC} \cdot v_{SA} \cdot A}{Z} - \frac{v_{SO} \cdot OP_2}{H_2} + \frac{v_{SO} \cdot OP_1}{H_2} + K_{ex,1} \cdot (OP_2 - OP_1)$$

$$[21] \quad \frac{dOP_3}{dt} = -\text{Min}_3 \cdot OP_3 + \frac{v_{psad} \cdot OP_3}{H_B} + \frac{v_{SO} \cdot OP_2}{H_B}$$

waarin: a_{PC} de constante P/C verhouding in organisch materiaal ($\text{mg P} \cdot \text{mg C}^{-1}$)
 θ_{ra} de temperatuurcoëfficiënt verlies biomassa(-)
 $K_{min,i}$ de snelheidsconstante voor de mineralisatie van organische stof in de betreffende laag (dag^{-1})
 OP_i het organisch fosfaatgehalte in laag 1, 2 of 3 ($\text{mg P} \cdot \text{m}^{-3}$)
 v_{sO} de sedimentatiesnelheid van organische stof ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)

en

$$[22] \quad Min_i = K_{min,i} \cdot \theta_{min}^{(T-20)}$$

met: Min_i de mineralisatie term (dag^{-1})
 K_{min} de mineralisatieconstante (dag^{-1})
 T_i de temperatuur, deze is voor het hypolimnion en de sedimenttoplaag hetzelfde ($^{\circ}\text{C}$)
 θ_{min} de mineralisatiecoëfficiënt (-)

ANORGANISCH FOSFAAT

Anorganisch fosfaat wordt onderscheiden in een opgeloste en particuliere fractie (DIP en PIP). Adsorptie en desorptie tussen beide fracties wordt verondersteld in evenwicht te zijn. De fractie opgelost anorganisch fosfaat wordt berekend met lineaire partitie en is gegeven door:

$$[23] \quad f_{DIP,i} = \frac{1}{1 + K_{pip,i} \cdot SS_i}$$

waarin: $K_{pip,i}$ de partiticoëfficiënt fosfaat in compartiment 1, 2 en 3 ($\text{m}^3 \cdot \text{g SS}^{-1}$)
 SS_i het sediment gehalte (zwevend stof voor $i=1$ en $i=2$; bodemsediment voor $i=3$)

Op deze wijze kunnen verschillen in adsorptie- en desorptiekaracteristieken tussen de verschillende compartimenten in rekening worden gebracht. De fracties opgelost en particulier fosfaat worden dan gegeven door respectievelijk:

$$[24] \quad DIP_i = f_{DIP,i} \cdot TIP_i$$

$$[25] \quad PIP_i = \frac{(1 - f_{DIP,i}) \cdot TIP_i}{SS_i}$$

Bij vergelijking 24 wordt opgemerkt dat deze vergelijking voor de beschrijving van DIP in de sedimenttoplaag door de porositeit moet worden gedeeld.

In de bovenlaag van de waterkolom wordt DIP door de algen opgenomen. DIP komt vrij bij de mineralisatie van organisch fosfaat. Particulair anorganisch materiaal is onderhevig aan sedimentatie. Pseudo-advectie ten gevolge van sedimentatie leidt in de sediment toplaag tot transport van fosfaat naar het onderliggende sediment. De vergelijkingen voor de drie compartimenten worden gegeven door:

$$[26] \quad \frac{dTIP_1}{dt} = -a_{PC} \cdot \mu_{max,20} \cdot F_L \cdot F_T \cdot F_N \cdot A + Min_1 \cdot OP_1 - \frac{v_{SS} \cdot (1 - f_{DIP,1}) \cdot TIP_1}{H_1} + K_{ex,1} \cdot (TIP_2 - TIP_1)$$

$$[27] \quad \frac{dTIP_2}{dt} = Min_2 \cdot OP_2 - \frac{v_{SS} \cdot (1 - f_{DIP,2}) \cdot TIP_2}{H_2 \cdot SSW_2} + \frac{v_s \cdot POR \cdot DIP_2}{H_2} + \frac{v_{SS} \cdot (1 - f_{DIP,1}) \cdot TIP_1}{H_2} + K_{ex,2} \cdot (TIP_1 - TIP_2) + \frac{FipD}{H_2}$$

$$[28] \quad \frac{dTIP_3}{dt} = -Min_3 \cdot OP_3 - \frac{FipD}{H_B} - \frac{FipDL}{H_B} - \frac{v_{psad} \cdot TIP_3}{H_B} + \frac{F_{sed,2} \cdot PIP_2}{H_B} + \frac{v_s \cdot POR \cdot DIP_2}{H_B}$$

Waarin de diffusieve uitwisseling tussen sediment en water (FipD) en sediment top- en onderlaag (FipDL) wordt gegeven door:

$$[29] \quad FipD = K_{dif} \cdot (DIP_3 - DIP_2)$$

$$[30] \quad FipDL = K_{dif,2} \cdot (DIP_3 - DIP_{LB})$$

9.3 Benodigde invoer

Hier wordt slechts de invoer met betrekking tot de kwaliteit beschreven. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding (EDS, 1995). In tabel 9.1 zijn alle specifieke invoergegevens van het model PUT weergegeven.

Algemeen geldt, dat ten behoeve van een waterkwaliteitssimulatie de volgende invoer moet worden opgegeven:

- initiële condities
- randvoorwaarden inclusief puntlozingen
- externe variabelen

9.3.1 Initiële condities

Voor het model geldt, dat op elke knoop in het netwerk de concentratie van alle toestandsvariabelen op het tijdstip van aanvang van de simulatie ($t=0$) moet worden opgegeven. In sommige gevallen kan dat op basis van gemeten waarden.

Het model PUT zal veelal worden gebruikt om het effect van zich wijzigende menging over de verticaal te onderzoeken. Daar het model slechts wordt toegepast over korte tijdschalen (bijvoorbeeld een zomerhalfjaar) en verticale menging een traag proces is, zal aan de keuze van de begintoestand extra aandacht moeten worden geschonken. Het kan enkele simulatieperiodes duren voordat het effect van de initiële condities is verdwenen. Het is dan ook zaak voor elke simulatie het model in te rekenen. Dat wil zeggen dat een aantal inleidende simulaties moet worden uitgevoerd, waarvan de toestand aan het eind van elke simulatie wordt gebruikt als beginsituatie voor de volgende simulatie. Het gebruik van de optie 'new initial conditions', te vinden in de scenario manager, is hierbij handig.

Tabel 9.1

Benodigde invoer model PUT

Type	Naam	Bron	Typische waarde
Initiële condities	A	Algenbiomassa	meting/schatting mg C.l ⁻¹
	TIP1	Anorganisch fosfaat epilimnion	inrekenen mg P.l ⁻¹
	TIP2	Anorganisch fosfaat hypolimnion	mg P.l ⁻¹
	TIP3	Anorganisch fosfaat sedimenttoplaag	mg P.l ⁻¹
	TIPLB	Anorganisch fosfaat sedimentonderlaag	mg P.l ⁻¹
	TOP1	Organisch fosfaat epilimnion	mg P.l ⁻¹
	TOP2	Organisch fosfaat hypolimnion	mg P.l ⁻¹
	TOP3	Organisch fosfaat sedimenttoplaag	mg P.l ⁻¹
	TOPLB	Organisch fosfaat sedimentonderlaag	mg P.l ⁻¹
	SSW1	Zwevend stof epilimnion	mg SS.l ⁻¹
SSW2	Zwevend stof hypolimnion	mg SS.l ⁻¹	
Randvoorwaarden	A	Algenbiomassa	meting mg C.l ⁻¹
	TIP1	Anorganisch fosfaat epilimnion	mg P.l ⁻¹
	TOP1	Organisch fosfaat epilimnion	mg P.l ⁻¹
	SSW1	Zwevend stof epilimnion	mg SS.l ⁻¹
Parameters	α	Specifieke extinctie algen	literatuur 0.014-0.018 mg Chl.l ⁻¹ .m ⁻¹
	apc	Fosfaat/koolstofverhouding algen	meting zie tabel 7.2
	ϵ_0	Achtergrond extinctie	literatuur 1.0 m ⁻¹
	E_{dif}	Mechanische dispersie constante	meting 5.10 ⁻⁵ m ² .dag ⁻¹
	F_{org}	Fractie organische stof sediment	meting/schatting -
	HB	Dikte sedimenttoplaag	literatuur m
	I_{opt}	Optimale lichtintensiteit (Steele)	zie tabel 7.2
	K_{edif}	Afname constante mechanische dispersie	50 m ⁻¹
	K_{tA}	Verliesnelheid algen	zie tabel 7.2
	$K_{min,1}$	Mineralisatiesnelheid epilimnion	10 ⁻² - 10 ⁻¹ dag ⁻¹
	$K_{min,2}$	Mineralisatiesnelheid hypolimnion	10 ⁻³ - 10 ⁻² dag ⁻¹
	$K_{min,3}$	Mineralisatiesnelheid sediment	10 ⁻⁴ - 1 ⁻³ dag ⁻¹
	K_p	Monod constante fosfaat	zie tabel 7.2
	$K_{pip,1}$	Partiticoëfficiënt epilimnion	systemspecifiek m ³ .g SS ⁻¹
	$K_{pip,2}$	Partiticoëfficiënt hypolimnion	systemspecifiek m ³ .g SS ⁻¹
	$K_{pip,3}$	Partiticoëfficiënt sediment	systemspecifiek m ³ .g SS ⁻¹
	POR	Porositeit sediment	meting 0.6 - 0.9
	Q_{ex}	Uitwisselingsdebiet epi- en hypolimnion	schatting m ³ .dag ⁻¹
	ρ_{ano}	Dichtheid anorganische stof	2600 kg.m ⁻³
	ρ_{org}	Dichtheid organische stof	1100 kg.m ⁻³
	a_{chlC}	Koolstof/chlorofyl verhouding	literatuur zie tabel 7.2
	θ_{ga}	Temperatuurcoëfficiënt algengroei	1.040 - 1.080
	θ_{min}	Temperatuurcoëfficiënt mineralisatie	
	θ_{ra}	Temperatuurcoëfficiënt algen verlies	
	μ_{max}	Maximale groeisnelheid algen	zie tabel 7.2
	V_{sA}	Sedimentatiesnelheid algen	0.01-0.5 m.dag ⁻¹
	V_{sS}	Sedimentatiesnelheid zwevend stof	2-10 m.dag ⁻¹
V_{sO}	Sedimentatiesnelheid organische stof	0.5 -2 m.dag ⁻¹	
Externe variabelen	H2	Diepte van het hypolimnion	meting m
	L	Daglichtlengte	literatuur uren
	T ₁	Temperatuur Epilimnion	meting °C
	T ₂	Temperatuur Hypolimnion	°C
	I _a	Daggemiddelde instraling	KNMI W.m ⁻²
Flow variabelen	Z	Diepte Epilimnion	waterbeweging m
	V	Volume Epilimnion	m ³

9.3.2 Randvoorwaarden

Op de geografische randen moet de toestand van het systeem worden opgegeven. Daarnaast worden in DUFLOW ook alle puntlozingen als randvoorwaarden behandeld. Voor elke debiet- of peilrand in het waterbewegingsmodel moet een randvoorwaarde voor de kwaliteit worden ingevoerd. Deze weerspiegelt de kwaliteit van het water, dat het netwerk binnenkomt of dat op het netwerk wordt geloosd. Voor elke toestandsvariabele, die wordt gedefinieerd moet een randvoorwaarde worden ingevoerd. Randvoorwaarden kunnen als functie van de tijd en als constante waarde worden ingevoerd. Voor het model Put geldt, dat alle lozingen en ook al het water dat over de systeemranden gaat, toe komt of wordt onttrokken aan het epilimnion. Hierbij wordt het hypolimnion als stagnant verondersteld; hierin vindt ook geen stroming of horizontaal transport door dispersie plaats.

Het uitdrukken van algenbiomassa in mg C.l^{-1} houdt in dat de concentratie op de randen van het systeem en in lozingen ook in deze eenheid moet worden uitgedrukt. In de praktijk wordt de biomassa meestal uitgedrukt in Chl-a. Omrekening kan geschieden met behulp van een vaste koolstof/chlorofyl verhouding (a_{CA}). Indien op de randen en van lozingen zowel totaal fosfaat als ortho-fosfaat gehalten bekend zijn, kan het particulier fosfaatgehalte (PP) worden berekend uit het verschil van deze twee. Indien niet beiden bekend zijn, zal de verdeling over opgelost en particulier fosfaat geschat moeten worden.

9.3.3 Parameters

Voor de parameterwaarden in de beschrijving van de groei van algen in de fosfaat-huishouding wordt verwezen naar de modellen EUTROF1A en EUTROF2A. Hier zal nader worden ingegaan op de uitwisseling tussen epi- en hypolimnion. De uitwisseling wordt beschreven met een uitwisselingsdebiet. Dit debiet is gerelateerd aan een verticale dispersie constante en beschrijft de verticale menging. De menging hangt af van de stabiliteit van de stratificatie. In het algemeen geldt, dat voor gestratificeerde systemen het dispersief transport over de spronglaag gering zal zijn. Een schatting van de verticale dispersieconstante kan worden verkregen uit de relatie van Imboden en Gächter (1979). Deze relatie geldt voor systemen van 20 tot 40 m diepte. Er geldt:

$$[31] \quad E_z = 1.7 \cdot 10^{-4} \cdot N^{-0.82}$$

waarin: E_z de verticale dispersiecoëfficiënt ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$),
 N de zogenaamde stabiliteitsfrequentie; deze wordt weergegeven door:

$$[32] \quad N^2 = \frac{g}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial Z}$$

waarin: g de versnelling van de zwaartekracht ($9,8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$)
 $\partial \rho$ het dichtheidsverschil van water op twee punten ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)
 ∂Z de afstand tussen twee punten waarop de dichtheid wordt gemeten (m)
De diepte is in deze formule negatief gedefinieerd.

De vergelijking voor E_z geeft slechts een indruk van de orde van grootte. Zo worden in deze vergelijking niet de diepte waarop de spronglaag en de stijklengte meegenomen. Factoren, die allebei wel van belang zijn.

Een andere manier om een schatting te verkrijgen van de waarde van E_z is de beschrijving volgens Thomann and Mueller (Thomann en Mueller, 1987). Zij schatten de verticale dispersie constante uit waargenomen verticale temperatuurprofielen. Er van uitgaande, dat alle warmte in het epilimnion wordt gedissipeerd, geldt voor de opwarmingsnelheid van het hypolimnion:

$$[33] \quad V_h \cdot \frac{\Delta T_h}{\Delta t} = \frac{E_z \cdot A}{Z} \cdot (T_e - T_h)$$

waarin: V_h het volume van het hypolimnion (m^3)
 $\Delta T_h / \Delta t$ de opwarmingsnelheid van het hypolimnion ($^{\circ}C \cdot dag^{-1}$)
 A het uitwisselend oppervlak (m^2)
 T_e, T_h de temperatuur van het epi- en hypolimnion ($^{\circ}C$)
 Z de afstand tussen de middens van epi- en hypolimnion (m)

Uit de vergelijking volgt de aanname, dat de opwarming van het hypolimnion alleen wordt veroorzaakt door de uitwisseling van warmte met de bovenlaag. Indien nu met een frequentie van bijvoorbeeld eens per maand de temperatuur in boven- en onderlaag wordt gemeten, kan men met vergelijking 33 een schatting van het verloop van de verticale menging over het seizoen verkrijgen. De meetwaarden kunnen als tijd-functie worden ingevoerd.

Indien een schatting van de verticale dispersie constante voorhanden is, kan deze worden omgerekend naar een uitwisselingsdebiet met behulp van:

$$[34] \quad Q_{ex} = \frac{E_z \cdot A}{Z}$$

waarin: Q_{ex} het uitwisselingsdebiet ($m^3 \cdot dag^{-1}$)
 E_z de verticale dispersieconstante ($m^2 \cdot dag^{-1}$)
 A het uitwisselend oppervlak in (m^2)
 Z de afstand tussen de middens van beide lagen (m)

9.3.4 Externe variabelen

De grootheden gemiddelde instraling lichtperiode, daglichtlengte, temperatuur en diepte van het hypolimnion worden hieronder besproken.

- De dagsommen straling worden op de meeste stations van het KNMI geregistreerd. Het gaat hierom de dagsom globale straling, hetgeen een groter golflengtegebied omvat dan het voor de fotosynthese interessante deel van de straling (PAR ca. 400-700 nm). Het aandeel van de PAR bedraagt ca. 50 % van de globale straling.
- Een goede benadering van de daglengte kan worden verkregen uit het theoretische maximaal aantal zonschijnuren. Deze zijn ondermeer getabelleerd in het Cultureel-technische Vademecum (1988).
- De watertemperatuur kan voor beide lagen als functie van de tijd worden ingevoerd.

– De diepte van het hypolimnion, H_2 , dient als externe variabele te worden opgegeven. Nogmaals wordt benadrukt, dat alleen de bovenlaag wordt doorstroomd en de onderlaag als stagnant wordt beschouwd.

9.4 Uitvoer

Naast de in het model gedefinieerde toestandsvariabelen kunnen een aantal afgeleide grootheden worden uitgevoerd. Deze zijn als functie gedefinieerd en kunnen als zodanig als uitvoervariabele gedefinieerd worden. Het gaat om de volgende concentraties, die in de praktijk ook vaak worden gemeten:

$CHLA = TchI * A$	het chlorofylgehalte ($mg\ Chl.m^{-3}$)
$PTOT1 = apc\ A + TIP1 + TOP1$	de totaal fosfaatconcentratie in het epilimnion ($g\ P.m^{-3}$)
$PTOT2 = TIP2 + TOP2$	de totaal fosfaatconcentratie in het hypolimnion ($g\ P.m^{-3}$)
$PTOT3 + (TIP3 + TOP3) / SSB$	de totaal fosfaat in sedimenttoplaag ($g\ P.\ g\ sediment^{-1}$)

Naast bovengenoemde grootheden zijn nog een groot aantal tussenresultaten als functie uit te voeren. Deze kunnen soms van belang zijn bij de nadere analyse van de uitkomsten. Genoemd worden ondermeer de licht- en nutriënten limitatiefactoren F_L en F_N , de actuele groeisnelheid van de algen Gr en de totale extinctie ϵ_{tot} .

9.5 Voorbeeld

9.5.1 Situatieschets

Dit hypothetisch voorbeeld betreft een gestratificeerde zandwinput met een diepte van 11 m en een oppervlak van 25 ha. De spronglaag ligt op 3 m onder het wateroppervlak. Boven en onder de spronglaag bevindt zich een waterlaag die in dit model ideaal is gemengd. Met het model wordt nagegaan wat het effect is van een kunstmatige verhoging van de verticale menging op de biomassa en het fosfaat gehalte. Het systeem wordt doorspoeld. De water heeft een verblijftijd, gebaseerd op het totaalvolume, van ongeveer 3 maanden. De totale belasting met fosfaat bedraagt bijna $3\ g\ P.m^{-2}.jaar^{-1}$.

9.5.2 DUFLOW invoer

CALCULATION SETTINGS

Er wordt gerekend met een tijdstap van één dag voor zowel de waterbeweging als voor de kwaliteit. De totale simulatieperiode loopt van 1 april tot 1 oktober en omvat alleen het groeiseizoen. Aangenomen is, dat gedurende deze periode sprake is van een stabiele stratificatie en dat de spronglaag op dezelfde diepte blijft liggen. Het uitvoerinterval is op 24 uur gezet voor alle kwaliteitsvariabelen en alle functies, die in dit model zijn gedefinieerd.

HET NETWERK

Het systeem wordt beschreven met behulp van slechts één sectie. De diepte van de bodem van deze sectie is gelijk aan -3,0 m. en representeert de diepte van de spronglaag.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor de FLOW zijn vastgesteld met 'new initial conditions'. De initiële concentraties van alle toestandsvariabelen zijn met 'new initial conditions' vastgesteld. De evenwichtsconcentraties aan het eind van de simulatie zijn als initiële condities voor de eigenlijke berekening gebruikt. Met name voor de situatie waarin menging van de waterlagen kunstmatig verhoogd is, is dit van belang, omdat anders het effect van de initiële condities grote invloed heeft op de uitkomsten.

RANDVOORWAARDEN

Bovenstrooms van knoop 1 is om de doorspoeling van in het systeem te simuleren, een constant debiet van $0,3 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ als randvoorwaarde voor knoop 1 opgegeven. Eenzelfde debiet is als onttrekking opgegeven op knoop 2.

De kwaliteit van het doorspoelwater is als randvoorwaarde op knoop 1 opgegeven. Hiervoor zijn de volgende kwalitatieve randvoorwaarden gebruikt:

TOP1	de totale concentratie organisch fosfaat in de toplaag van $0,025 \text{ g P m}^{-3}$
TIP1	de totale concentratie anorganisch fosfaat in de toplaag van $0,050 \text{ g P m}^{-3}$
A	de algenbiomassa in de toplaag bedraagt $1,0 \text{ g C m}^{-3}$
SSW	het zwevende-stofgehalte is 50 g m^{-3}

Op knoop 2 is voor alle variabelen een randvoorwaarde van nul opgegeven. Eigenlijk is dit niet nodig, omdat het water daar toch altijd uitstroomt. Er is toch een randvoorwaarde opgegeven om te voorkomen dat DUFLOW een waarschuwing geeft, dat bij de flowrandvoorwaarde 2 geen kwaliteitsrandvoorwaarde is opgegeven.

EXTERNE VARIABELEN

Verondersteld is dat de totale diepte gelijk is aan 11 m. In het systeem is de verticale ligging van de spronglaag opgegeven als -3 m. Hieruit volgt dat de diepte van het epilimnion gelijk is aan 3 m en dat de diepte van het hypolimnion gelijk is aan 8 m. De diepte van het hypolimnion wordt als externe variabele ingevoerd. Het model test niet of de verschillende diepten consistent zijn met de totale diepte. Dit behoort dus tot de verantwoordelijkheid van de gebruiker.

Alhoewel externe variabelen als tijd functie mogen worden ingevoerd gaat dit niet op voor de diepte van het hypolimnion. Deze variabele dient over de hele simulatieperiode gelijk te blijven. Wel mag per sectie een andere waarde worden ingevoerd.

De waarde van de horizontale dispersie constante is groot gekozen in deze simulatie, om er voor te zorgen dat het systeem ideaal gemengd blijft. Het model gebruikt een waarde van $250 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Voor de andere externe variabelen wordt verwezen naar de modellen EUTROF1A en EUTROF2A.

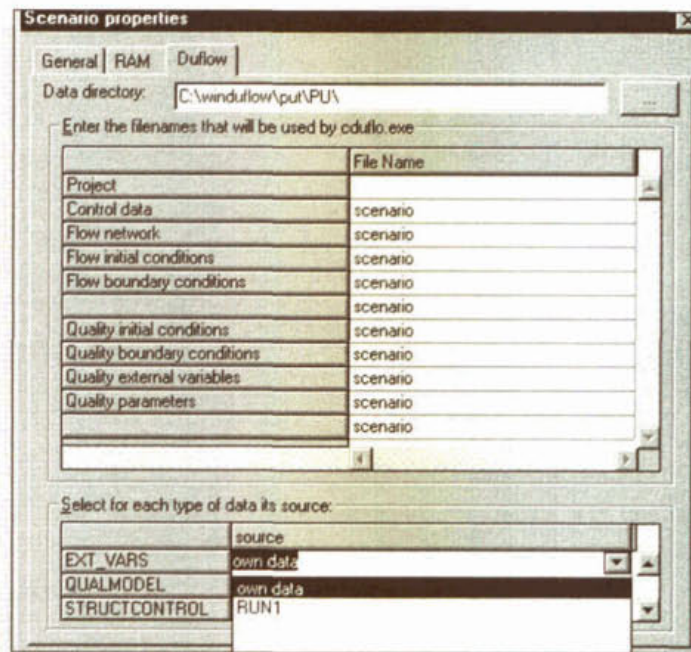
PARAMETERS

Voor de parameters in de beschrijving van de algengroei en de fosfaathuishouding zijn default waarden gebruikt. Het uitwisselingsdebiet is gelijk gesteld aan $40.000 \text{ m}^3 \cdot \text{dag}^{-1}$. Hetgeen overeenkomt met een waarde van E_z van ca. $0,1 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

9.5.3 Resultaten

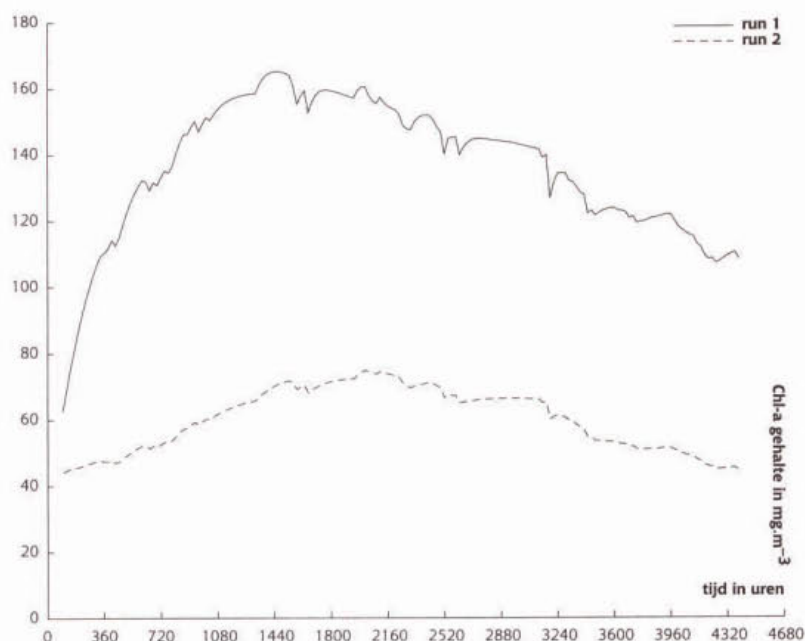
De weergegeven grafieken in deze paragraaf tonen de resultaten van twee simulaties. Bij de eerste simulatie (scenario 'RUN1') is de diepte H2 op -3m gezet. Bij de tweede simulatie (scenario 'RUN2') bedraagt deze diepte -8m. Daartoe is in scenario 'RUN2' via het menu scenario, optie 'properties' in de DUFLOW tab aangegeven dat de externe variabelen gebaseerd zijn op eigen gegevens. In figuur 9.2 is het betreffende scherm aangegeven. In beide scenario's is het uitwisselingsdebiet $40.000 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$.

Figuur 9.2 Wijzigingen aanbrengen in een tweede scenario



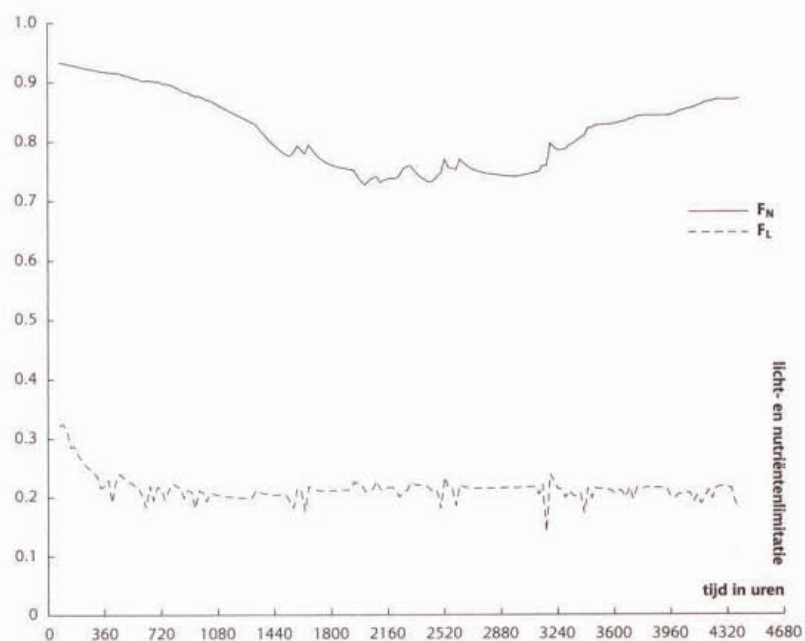
Figuur 9.3 toont het verloop van het chlorofylgehalte in het epilimnion gedurende het zomerhalfjaar. Run 1 geeft de uitgangssituatie. De maximale biomassa bedraagt in dit geval ongeveer $150 \text{ mg Chl-a} \cdot \text{m}^{-3}$. In Run 2 is het effect van kunstmatige menging onderzocht. Deze is gesimuleerd door het uitwisselingsdebiet tussen het epi- en hypolimnion te vergroten en de spronglaag dieper te leggen. Het gevolg hiervan is een sterke afname van de algen biomassa.

Figuur 9.3 Effect van kunstmatige menging op de algen biomassa (sectie 1)

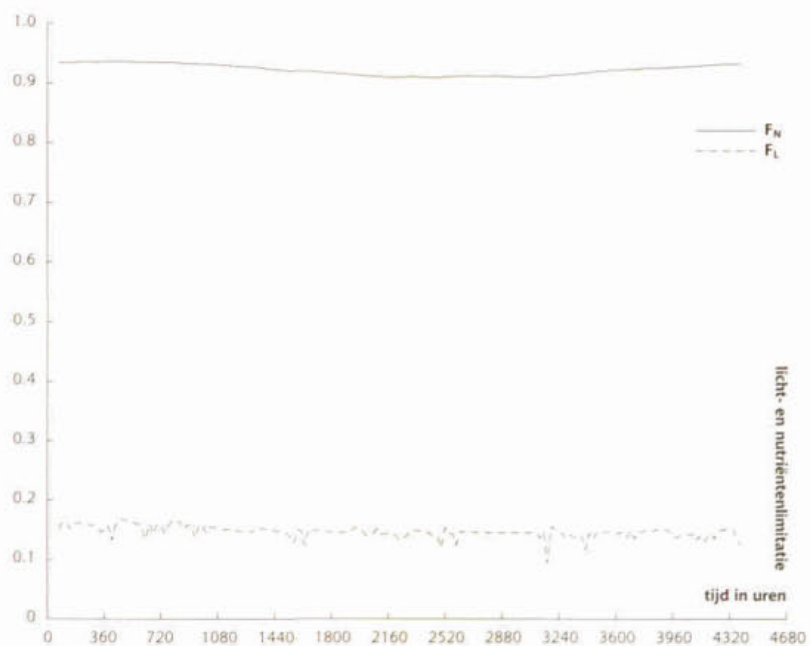


Deze daling is veroorzaakt door een toename van de lichtlimitatie, doordat door de kunstmatige menging de dikte van de toplaag toeneemt waardoor de gemiddelde lichtintensiteit afneemt. Weliswaar neemt het fosfaatgehalte in de toplaag toe door de intensievere menging, dit weegt echter niet op tegen het effect van de minder gunstige lichtcondities (zie figuren 9.4 en 9.5).

Figuur 9.4 Licht- en nutriëntenlimitatiefactor in de uitgangssituatie



Figuur 9.5 Licht- en nutriëntenlimitatiefactor na kunstmatige menging



Literatuur

Cultuurtechnische Vereniging, 1988, Cultuurtechnisch Vademecum, Utrecht

Imboden, D.M., en Gächter, R., 1979, The Impact of Physical Processes on the Trophic State of a Lake in Biological Aspects of Freshwater Pollution, O. Ravera, Ed., Pergamon, New York

STOWA 1998, Duflow for Windows, Stowarapport 98-19.

Thomann, R.V. en Mueller, J.A., 1987, Principles of Surface Water Quality Modelling and Control, New York

■ Bijlage 1

Procesbeschrijvingen model PUT (PUT.MOD)

/*				*/
/*	MODEL PUT			*/
/*	Voor licht- en fosfaatgelimiteerde algengroei in een gestratificeerd systeem			*/
/*	STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW			*/
/*				*/
/*	Landbouwuniversiteit Wageningen			*/
/*	Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie			*/
/*	Postbus 8080			*/
/*	6700 DD Wageningen			*/
/*				*/
water	A	[1.000]	mg-C/l	; algenbiomassa
water	IP1	[0.400]	mg-P/l	; anorganisch fosfaat bovenlaag
water	OP1	[0.110]	mg-P/l	; organisch fosfaat bovenlaag
water	SW1	[10.00]	mg-SS/l	; zwevende stof bovenlaag
bottom	IP2	[0.400]	mg-P/l	; anorganisch fosfaat onderlaag
bottom	IP3	[500.0]	mg-P/l	; anorganisch fosfaat bodem top laag
bottom	OP2	[0.110]	mg-P/l	; organisch fosfaat onderlaag
bottom	OP3	[300.0]	mg-P/l	; organisch fosfaat bodem top laag
bottom	SW2	[10.00]	mg-SS/l	; zwevende stof onderlaag
bottom	TIPLB	[500.0]	mg-P/l	; anorganisch fosfaat bodem sub laag
bottom	TOPLB	[300.0]	mg-P/l	; organisch fosfaat bodem sub laag
parm	alfa	[0.01600]	ug Chl/l.m	; specifieke extinctie chlorofyl
parm	Apc	[0.01000]	mg-P/mg-C	; fosfaat/koolstof verhouding
parm	e0	[2.00000]	1/m	; achtergrondextinctie
parm	Edif	[0.00005]	m2/dag	; mechanische dispersie constante sediment
parm	Forg	[0.25000]	-	; fractie organische stof sediment
parm	HB	[0.10000]	m	; dikte actieve sediment top laag
parm	lopt	[40.0000]	W/m2	; optimale lichtintensiteit
parm	Kedif	[50.0000]	1/m	; afname constante mechanische dispersie
parm	Kla	[0.20000]	1/dag	; snelheidsconstante algenverlies
parm	Kmin1	[0.10000]	1/dag	; snelheidsconstante min. top laag
parm	Kmin2	[0.00500]	1/dag	; snelheidsconstante min. onderlaag
parm	Kmin3	[0.00100]	1/dag	; snelheidsconstante min. sediment
parm	Kp	[0.00500]	mg-P/l	; monod constante fosfaat
parm	Kpip1	[0.01000]	m3/g-SS	; partitie constante water top laag
parm	Kpip2	[0.00020]	m3/g-SS	; partitie constante water onderlaag
parm	Kpip3	[0.00020]	m3/g-SS	; partitie constante sediment top laag
parm	POR	[0.80000]	-	; porositeit sediment
parm	Qex	[8640.00]	m3/dag	; uitwisselingsdebiet
parm	RHOINO	[2600.00]	kg/m3	; dichtheid anorganische stof
parm	RHOORG	[1000.00]	kg/m3	; dichtheid organische stof
parm	Tchl	[30.0000]	ug-Chl/mgC	; chlorofyl/koolstof verhouding
parm	Tga	[1.06000]	-	; temperatuur coëfficiënt algengroei
parm	Tmin	[1.06000]	-	; temperatuur coëfficiënt mineralisatie
parm	Tra	[1.06000]	-	; temperatuur coëfficiënt verlies
parm	Umax	[1.70000]	1/dag	; maximale groeisnelheid algen
parm	VsA	[0.15000]	m/dag	; sedimentatiesnelheid algen
parm	VsO	[0.25000]	m/dag	; sedimentatiesnelheid organische stof
parm	Vss	[1.00000]	m/dag	; sedimentatiesnelheid zwevende stof
xt	H2	[5.0000]	m	; diepte onderlaag
xt	la	[100.00]	W/m2	; gemiddelde instraling lichte periode
xt	L	[12.000]	uur	; aantal uren daglicht
xt	T1	[20.000]	oC	; temperatuur water (top laag)
xt	T2	[20.000]	oC	; temperatuur water (onderlaag)
flow	V	[1.000]	m3	; volume bovenlaag
flow	Z	[1.000]	m	; diepte bovenlaag

```

{
OPP=V/Z;
V1=V;
V2=OPP*H2;
Kex1=Qex/V1;
Kex2=Qex/V2;

Kdif=(0.00001+Edif)/(0.5*HB);
Kdif2=(0.00001+Edif*exp(-kedif*HB))/(0.5*HB);

RHO=Forg*RHOORG+(1-Forg)*RHOINO;
SSb=RHO*1000*(1-POR);

k1(SSw1)=-Vss/Z-Kex1;
k0(SSw1)=Kex1*SSw2;
k1(SSw2)=-Vss/H2-Kex2;
k0(SSw2)=Kex2*SSw1+Vss*SSw1/H2;

Fsed1=Vss*SSw1;
Fsed2=Vss*SSw2;
Vs=Fsed2/(RHO*(1-POR)*1000);
Vpsad=Vs;

Chla=Tchl*A;
etot=e0+alfa*Chla;
alfa0=la/lopt;
alfa1=alfa0*exp(-1*etot*Z);
f=L/24;
fl=2.718*f*(exp(-1*alfa1)-exp(-1*alfa0))/(etot*Z);
ft=Tga^(T1-20);

fDIP1=1/(1+Kpip1*SSw1);
fDIP2=1/(1+Kpip2*SSw2);
fDIP3=1/(1+Kpip3*SSb);
DIP1=fDIP1*TIP1;
DIP2=fDIP2*TIP2;
DIP3=fDIP3*TIP3/POR;

fl=DIP1/(DIP1+Kp);
Gr=Umax*fl*ft*fn;
GrT=Gr*A;
Resp=KIA*Tra^(T1-20);
RespT=Resp*A;
SedA=VsA/Z;
SedAT=SedA*A;
k1(A)=Gr-Resp-SedA;

mino1=Kmin1*Tmin^(T1-20);
mino2=Kmin2*Tmin^(T2-20);
mino3=Kmin3*Tmin^(T2-20);

k1(TOP1)=-mino1-VsO/Z-Kex1;
k0(TOP1)=Apc*RespT+Kex1*TOP2;
k1(TOP2)=-mino2-(VsO/H2)-Kex2;
k0(TOP2)=Apc*SedAT+VsO*TOP1/H2+Kex2*TOP1;
k1(TOP3)=-mino3-Vpsad/HB;
k0(TOP3)=VsO*TOP2/HB;

PIP1=(1-fDIP1)*TIP1/SSw1;
PIP2=(1-fDIP2)*TIP2/SSw2;
PIP3=(1-fDIP3)*TIP3/SSb;
PIPLB=(1-fDIP3)*TIPLB/SSb;
DIPLB=fDIP3*TIPLB/POR;

FipD=Kdif*(DIP3-DIP2);
FipDL=Kdif2*(DIP3-DIPLB);
FipS=Fsed2*PIP2+Vs*POR*DIP2;

```

$$\text{FipB} = \text{Vpsad} * \text{TIP3};$$

$$k1(\text{TIP1}) = -\text{Vss} * (1 - \text{fDIP1}) / \text{Z} - \text{Kex1};$$

$$k0(\text{TIP1}) = -\text{Apc} * \text{GrT} + \text{mino1} * \text{TOP1} + \text{Kex1} * \text{TIP2};$$

$$k1(\text{TIP2}) = -\text{Kex2};$$

$$k0(\text{TIP2}) = \text{Vss} * (1 - \text{fDIP1}) * \text{TIP1} / \text{H2} + \text{Kex2} * \text{TIP1} + \text{mino2} * \text{TOP2} + (\text{FipD} - \text{FipS}) / \text{H2};$$

$$k0(\text{TIP3}) = \text{mino3} * \text{TOP3} + (-\text{FipD} - \text{FipDL} + \text{FipS} - \text{FipB}) / \text{HB};$$

$$\text{Ptot1} = \text{APC} * \text{A} + \text{TIP1} + \text{TOP1};$$

$$\text{Ptot2} = \text{TIP2} + \text{TOP2};$$

$$\text{Ptot3} = (\text{TIP3} + \text{TOP3}) / \text{SSb};$$

}

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

OMIVE

model voor organische micro-verontreinigingen

juni 1997

hoofdstuk

10

R.H. Aalderink

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

10

Inhoudsopgave

10.1 OMIVE 5

- 10.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5
- 10.1.2 Beperkingen 5

10.2 Procesbeschrijvingen 6

- 10.2.1 Gesuspendeerde en vaste stof 6
- 10.2.2 Pseudo-advectief transport 8
- 10.2.3 Diffusieve uitwisseling 9
- 10.2.4 Organische stof in de waterkolom 9
- 10.2.5 Organische stof in het sediment 11
- 10.2.6 Partitie 12
- 10.2.7 Balansvergelijkingen voor een organische micro-verontreiniging 13
- 10.2.8 Uitvoervariabelen 15

10.3 Benodigde invoer 15

- 10.3.1 Initiële condities 17
- 10.3.2 Randvoorwaarden 17
- 10.3.3 Parameters 18
- 10.3.4 Externe variabelen 19

10.4 Voorbeeld Vecht 20

- 10.4.1 Situatieschets 20
- 10.4.2 DufLOW invoer 21
- 10.4.3 Resultaten 23

Literatuur 25

Bijlagen

Bijlage 1 *Procesbeschrijvingen organische micro-verontreinigingen (OMIVE.MOD)* 26

10.1 OMIVE

Dit model beschrijft het gedrag en het lot van hydrofobe organische verontreinigingen. Kenmerk van deze stoffen is dat ze veelal in zeer lage concentraties voorkomen en bij deze concentratieniveaus reeds toxisch zijn voor organismen. Veel van deze stoffen zijn persistent en accumuleren zowel in sediment als in organismen. De set procesbeschrijvingen in het OMIVE-model is gebaseerd op een model, dat is ontwikkeld in het kader van een onderzoek aan de Vecht. Dit onderzoek werd uitgevoerd in opdracht van de initiatiefgroep Restauratieplan Vecht. Ook het uitgewerkte voorbeeld in deze handleiding is ontleend aan deze studie.

Processen die in het model worden beschreven zijn:

- sorptie aan zwevende stof, particulier en opgelost organisch materiaal en algen;
- uitwisseling met de bodem van opgelost en particulier gebonden verontreinigingen;
- uitwisseling met de atmosfeer;
- en afbraak.

Daar sorptie een belangrijke rol speelt in het gedrag van organische micro-verontreinigingen, wordt ook het gedrag van sorbentia in detail beschreven. Zo worden er balansen bijgehouden van zwevende stof, particulier en opgelost organische stof, en algen.

10.1.1 Toepassingsmogelijkheden

Het model is in principe geschikt voor alle hydrofobe organische micro-verontreinigingen. Belangrijkste representanten uit deze groep van verontreinigingen zijn PCB's en PAK's. Ook het gedrag van andere meer of minder hydrofobe verbindingen zoals anilines, nitroamines, fenolen en dioxines kan met het model worden gesimuleerd.

Het model is vooral geschikt voor simulatie van het gedrag van systemen met lange tijdschalen. Hierbij moet men denken aan jaren tot decaden. In deze gevallen is het model geschikt voor het evalueren van scenario's voor belastingreductie.

Ook kan het model worden gebruikt om het effect na te gaan van wijzigingen in inlaatstrategieën, in verband met de verspreiding van verontreinigingen.

Een andere toepassing is het voorspellen van de snelheid en mate van belading van waterbodems. Hetgeen onder meer van belang is voor de beoordeling van het nut van een waterbodemsanering. Het model kan bijvoorbeeld voorspellen of, en hoe snel, een waterbodemsanering weer verontreinigd raakt.

10.1.2 Beperkingen

Het model gaat uit van een evenwicht tussen de opgeloste en gebonden microverontreinigingen. Impliciet is aangenomen, dat het sorptie-evenwicht zich zeer snel instelt. Dit is meestal gerechtvaardigd, omdat de tijdschalen waarvoor het model wordt toegepast enkele jaren tot decaden bedraagt. Het is echter ook bekend, dat voor sterk hydrofobe verbindingen de tijdsconstanten voor sorptie kunnen liggen in de orde van enkele maanden tot een jaar. In dat geval zou in plaats van een evenwichtspartitie, de kinetiek van het sorptie proces moeten worden beschreven.

Naast sorptie aan detritus, anorganisch materiaal en opgeloste organische stof wordt ook de sorptie aan algen in het model beschreven. De groei van algen wordt echter op

een eenvoudige wijze berekend. Er wordt weliswaar een balans voor algen-koolstof bijgehouden, maar de groei van algen als functie van licht, temperatuur en nutriënten wordt niet beschreven. De productiesnelheid van algenbiomassa dient door de gebruiker zelf te worden opgegeven. Dit kan eventueel als functie van tijd en plaats. Bioaccumulatie en transport in de voedselketens door graas en predatie worden niet in het model meegenomen. Dit betekent dat de interacties tussen het aquatisch ecosysteem en de lotgevallen van organische microverontreinigingen met het model niet kunnen worden gesimuleerd.

Afbraak door fotolyse, biodegradatie en hydrolyse wordt niet in detail beschreven. Verliezen door afbraak worden in rekening gebracht door één overall eerste orde afbraaksnelheidsconstante.

Ditzelfde geldt in principe ook voor de resuspensie van zwevend stof. De waarde voor de resuspensieflux wordt door de gebruiker opgegeven als externe variabele. Hierdoor kan de gebruiker de resuspensie toch in de tijd laten variëren.

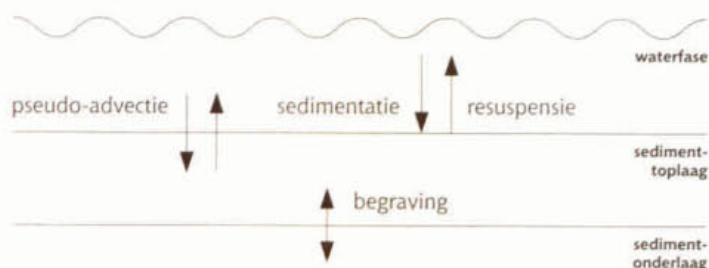
Tenslotte wordt in het model met een constante waarde voor de stofoverdracht van de microverontreiniging gewerkt. Hierdoor kunnen vluchtige microverontreinigingen niet gemodelleerd worden, tenzij een empirische vergelijking zoals vergelijking 28 (zie bladzij 18) in het model wordt geïmplementeerd.

10.2 Procesbeschrijvingen

10.2.1 Gesuspendeerde en vaste stof

Voor de beschrijving van de sediment- water uitwisseling dient ook het gedrag van zwevende stof te worden beschreven. Gekozen is voor een eenvoudige benadering (zie figuur 10.1). In het model voor microverontreinigingen, wordt het gedrag van een fractie zwevende stof in de waterkolom beschreven waarbij het uitgangspunt is, dat sedimentatie en resuspensie simultaan optreden. Wel wordt onderscheid gemaakt tussen organisch en anorganisch zwevend materiaal. De resuspensieflux zelf wordt in dit model niet berekend. Deze dient door de gebruiker te worden opgegeven. Voor de berekening van de resuspensieflux wordt verwezen naar de hoofdstukken 4 en 5, waar modellen worden beschreven voor het gedrag van slib. De interactie met de bodem wordt beschreven middels de uitwisseling met een actieve toplaag. De dikte van deze laag wordt constant verondersteld.

Figuur 10.1 Gedrag van zwevend stof en interactie met de bodem.



WATERKOLOM

Voor het totaal zwevende stof (anorganisch plus organisch) in de waterkolom geldt de volgende balansvergelijking:

$$[1] \quad \frac{dSS_W}{dt} = \frac{-v_{SS} \cdot SS_W}{z} + \frac{F_{res}}{z} + \frac{K_{d,AOC} \cdot \alpha \cdot AOC_W}{FC} - \frac{K_{hyd,W} \cdot POC_W}{FC}$$

waarin:

- SS_W het totaal zwevend stofgehalte in de waterkolom ($g\ SS.m^{-3}$)
- AOC_W aan algen gebonden organisch koolstof ($g\ AOC.m^{-3}$)
- POC_W het particulier organisch koolstof (detritus) ($g\ POC.m^{-3}$)
- v_{SS} de sedimentatiesnelheid totaal zwevende stof ($m.dag^{-1}$)
- F_{res} de resuspensieflux totaal zwevende stof ($g.m^{-2}.dag^{-1}$)
- $K_{d,AOC}$ de snelheidsconstante afsterving algen (dag^{-1})
- $K_{hyd,W}$ de snelheidsconstante hydrolyse detritus (dag^{-1})
- α de fractie POC die vrijkomt bij afsterving algen ($g\ POC.g\ AOC^{-1}$)
- FC de verhouding koolstof/droge stof in algen en detritus ($g\ C.g\ SS^{-1}$)
- z de waterdiepte (m)

De eerste twee termen beschrijven de sedimentatie en resuspensie van totaal zwevende stof. De derde term beschrijft de aanname, dat zwevende stof wordt gevormd bij de afsterving van algen (detritusvorming). Tenslotte geeft de laatste term weer, dat het detritus onderhevig is aan afbraak.

BODEM

Het concept van de actieve toplaag met een constante dikte resulteert in een constante concentratie vaste stof in de toplaag. Uit dit concept volgt, dat voor de totaal concentratie vaste stof in de bodem geldt:

$$[2] \quad SS_B = \rho_{SS} \cdot (1-POR)$$

waarin:

- SS_B de vaste stofconcentratie in de bodem toplaag ($g\ SS.m^{-3}$)
- ρ_{SS} de dichtheid van vaste stof ($g.m^{-3}$)
- POR de porositeit van de toplaag (-)

Vanwege de variatie van het organische stofgehalte in de bodem (POC_B) door bijvoorbeeld mineralisatie (zie vergelijking 18), verandert de samenstelling van de vaste stof in de bodem. Deze variatie in de verdeling is van belang voor de berekening hoeveel stof kan accumuleren in het systeem. Vergelijking 3 beschrijft daarom de verdeling over anorganisch en organisch stof. De eerste term in deze vergelijking is gelijk aan de concentratie anorganisch stof, terwijl de tweede term het organisch stofgehalte beschrijft.

$$[3] \quad SS_B = \rho_{anorg} \cdot \left[(1-POR) - \frac{POC_B}{FC \cdot \rho_{org}} \right] + \frac{POC_B}{FC}$$

waarin:

- POC_B het gehalte particulier organisch koolstof in de bodem ($g\ POC.m^{-3}$)
- ρ_{anorg} de dichtheid van de anorganische stof ($g.m^{-3}$)
- ρ_{org} de dichtheid van organische stof ($g.m^{-3}$)

10.2.2 Pseudo-advectief transport

Door de ophoping van het sedimenteerend materiaal verschuift het grensvlak water bodem in opwaartse richting. Door de veronderstelling dat de dikte van top laag constant is, betekent dit echter ook, dat het grensvlak tussen de actieve top laag en de onderlaag van het sediment verschuift. Dit houdt in, dat materiaal vanuit de top laag naar de onderlaag wordt getransporteerd. Het omgekeerde geldt bij resuspensie. Hier wordt materiaal van de onderlaag getransporteerd naar de sedimenttop laag. Dit geeft aanleiding tot de invoering van een tweetal transportsnelheden. Deze beschrijven het zogenaamde pseudo-advectief transport. De afleiding van pseudo-advectief transport volgt dus uit het concept van de actieve top laag met een constante diepte.

De twee pseudo-advectief transportsnelheden worden gegeven door:

$$[4] \quad v_s = \frac{F_{sed}}{(1-POR) \cdot \rho_{SSW}}$$
$$v_r = \frac{F_{res}}{(1-POR) \cdot \rho_{SSB}}$$

waarin:

- v_s de pseudo-sedimentatie snelheid (m.dag⁻¹)
- v_r de pseudo-resuspensie snelheid (m.dag⁻¹)
- F_{sed} de sedimentatieflux, gelijk aan $V_{SS} \cdot SS_W$ (g SS.m⁻².dag⁻¹)
- F_{res} de resuspensieflux (g SS.m⁻².dag⁻¹)
- ρ_{SSW} de dichtheid van de zwevende stof in de waterkolom (g.m⁻³)
- ρ_{SSB} de dichtheid van de vaste stof in de sediment top laag (g.m⁻³)

De twee genoemde dichtheden zijn variabel, doordat de samenstelling van de vaste stof kan veranderen. De volgende uitdrukkingen zijn afgeleid:

$$[5] \quad \rho_{SSW} = \frac{\rho_{org} \cdot F_{om,W}}{F_{om,W} + F_{SS,W}} + \frac{\rho_{anorg} \cdot F_{SS,W}}{F_{om,W} + F_{SS,W}}$$

$$[6] \quad \rho_{SSB} = \frac{\rho_{org} \cdot F_{om,B}}{F_{om,B} + F_{SS,B}} + \frac{\rho_{anorg} \cdot F_{SS,B}}{F_{om,B} + F_{SS,B}}$$

waarin:

$$[7] \quad F_{om,W} = \frac{F_{C_{SS,W}}}{\rho_{org}}$$

$$[8] \quad F_{SS,W} = \frac{1 - F_{C_{SS,W}}}{\rho_{anorg}}$$

$$[9] \quad F_{om,B} = \frac{F_{C_{SS,B}}}{\rho_{org}}$$

$$[10] \quad F_{SS,B} = \frac{1 - F_{C_{SS,B}}}{\rho_{anorg}}$$

Met $F_{C_{SS,W}}$ en $F_{C_{SS,B}}$ respectievelijk de fractie organische stof in de waterkolom en de fractie in de sedimenttop laag. Hiervoor geldt:

$$[11] \quad F_{c_{SS,W}} = \frac{POC_W}{FC \cdot SS_W}$$

$$[12] \quad F_{c_{SS,B}} = \frac{POC_B}{FC \cdot SS_B}$$

10.2.3 Diffusieve uitwisseling

Naast uitwisseling gerelateerd aan resuspensie en sedimentatie, vindt er voor de opgeloste verontreinigingen ook diffusief transport plaats over het grensvlak water-sediment. Dit transportproces wordt beschreven met wet van Fick. Deze wet veronderstelt een rechtevenredigheid tussen de uitwisselingsflux Φ en de concentratiegradiënt. De wet van Fick luidt:

$$[13] \quad \Phi = E \cdot \frac{dC}{dz}$$

De concentratiegradiënt wordt in het model benaderd door het verschil tussen de concentratie in de waterkolom en het poriewater van de sedimenttoplaag, te delen door de halve dikte van de actieve sedimenttoplaag.

De evenredigheidsconstante (E) heeft hier het karakter van een diffusieconstante. Echter, in ondiep water is de waarde van E vaak groter dan de moleculaire diffusieconstante. Door het optreden van wind-geïnduceerde golven ontstaan drukgradiënten in het sediment, die het transport over het grensvlak water-bodem vergroten. Dit kan worden beschreven met een zogenaamde mechanische dispersieconstante. Deze neemt exponentieel af met de diepte in het sediment. Portielje (1994) geeft hiervoor de volgende benadering:

$$[14] \quad E_z(h) = 1.0 \cdot 10^{-5} + E_{z,0} \cdot e^{(-50 \cdot h)}$$

waarin: $E_{z,0}$ de waarde van E_z aan het grensvlak water-sediment ($m^2 \cdot dag^{-1}$)
 h de afstand vanaf het grensvlak water-sediment (m)

Door in vergelijking 14 voor h de waarde van de dikte van de top laag te substitueren kan de dispersiecoëfficiënt op het grensvlak van sediment top- en onderlaag worden berekend.

10.2.4 Organisch stof in de waterkolom

Voor hydrofobe micro-verontreinigingen geldt, dat deze sterk adsorberen aan organisch stof. In het model is onderscheid gemaakt tussen koolstof in levende algen (AOC), en de koolstof in dood organisch materiaal (detritus). Het detritus wordt onderverdeeld in een opgeloste (DOC) en een particulaire fractie (POC).

Voor particulier organische stof, uitgedrukt als POC, in de waterkolom geldt:

$$[15] \quad \frac{dPOC_W}{dt} = -K_{hyd,W} \cdot POC_W - \frac{v_{SN} \cdot POC_W}{z} + K_{d,AOC,W} \cdot \alpha \cdot AOC_W + \frac{F_{res} \cdot POC_B}{z \cdot SS_B}$$

waarin:	POC_W	het particulier organisch koolstof in de waterkolom (g POC.m ⁻³)
	POC_B	het particulier organisch koolstof in de bodem (g POC.m ⁻³)
	SS_B	het gehalte totaal vaste stof in de bodem (g SS.m ⁻³)
	v_{SN}	de sedimentatiesnelheid van organisch materiaal (m.dag ⁻¹)
	$K_{hyd,W}$	de hydrolyse van POC in de waterkolom (dag ⁻¹)
	$K_{d,AOC,W}$	de afstervingsnelheid van algen in de waterkolom (dag ⁻¹)
	α	de fractie POC vrijkomend na afsterving algen (-)

POC wordt gevormd bij de afbraak van algen en is onderhevig aan hydrolyse en sedimentatie. De resuspensie van POC is gerelateerd aan de resuspensie van totaal zwevende stof. Na vermenigvuldiging van de resuspensieflux met de fractie organische stof in de bodem ontstaat de resuspensie term van POC.

Het DOC gehalte in de waterkolom wordt berekend als:

$$[16] \quad \frac{dDOC_W}{dt} = -K_{d,min,W} \cdot DOC_W + K_{hyd,W} \cdot POC_W + (1-\alpha) \cdot K_{d,AOC} \cdot AOC_W - \frac{E_z \cdot POR}{0,5 \cdot DZ \cdot z} \cdot (DOC_W - \frac{DOC_B}{POR}) + \frac{v_r \cdot DOC_B}{z} - \frac{v_s \cdot DOC_W}{z}$$

waarin:	DOC_B	het DOC gehalte in het sediment (g DOC.m ⁻³)
	DOC_W	het DOC gehalte in de waterkolom (g DOC.m ⁻³)
	$K_{d,min,W}$	de snelheidsconstante mineralisatie POC in het water (dag ⁻¹)
	E_z	de diffusieconstante aan het grensvlak water-bodem (m ² .dag ⁻¹)
	POR	de porositeit van de sedimenttoplaag (-)
	DZ	de dikte van de sedimenttoplaag (m)
	z	de waterdiepte (m)
	v_r	de pseudo-advectief transportsnelheid t.g.v. resuspensie (m.dag ⁻¹)
	v_s	de pseudo-advectief transportsnelheid t.g.v. sedimentatie (m.dag ⁻¹)
	$K_{d,AOC,W}$	de afstervingsnelheid van algen in de waterkolom (dag ⁻¹)
	α	de fractie POC vrijkomend na afsterving algen (-)

DOC in de waterkolom wordt gevormd bij de hydrolyse van POC en bij de afsterving van algen. Er wordt aangenomen dat bij de afsterving van algen een fractie $1-\alpha$ als DOC vrijkomt. De rest wordt toegekend aan het POC. Net als POC is DOC onderhevig aan mineralisatie, maar anders dan bij POC vindt er ook diffusieve uitwisseling plaats van DOC met de sedimenttoplaag. De laatste twee termen in de bovenstaande vergelijking beschrijven het pseudo-advectief transport.

De vergelijking voor AOC wordt gegeven door:

$$[17] \quad \frac{dAOC}{dt} = \frac{PAOC}{z} - (K_{d,AOC} + \frac{v_{SP}}{z}) \cdot AOC$$

waarin:	P_{AOC}	de productiesnelheid van AOC ($\text{g AOC} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{dag}^{-1}$)
	AOC	het organisch koolstof gehalte in algen ($\text{g AOC} \cdot \text{m}^{-3}$)
	v_{SP}	de sedimentatiesnelheid van algen ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)

Het P_{AOC} , representeert de productiviteit die (eventueel als functie van tijd en plaats) door de gebruiker kan worden opgegeven. In deze eenvoudige balansvergelijking wordt de groei van algen als functie van de omgevingscondities niet meegenomen.

10.2.5 Organisch stof in het sediment

De balansvergelijking voor POC in de bodem wordt gegeven door:

$$[18] \quad \frac{d\text{POC}_B}{dt} = -K_{\text{hyd},B} \cdot \text{POC}_B - \frac{F_{\text{res}} \cdot \text{POC}_B}{DZ \cdot \text{SS}_B} + \frac{v_{\text{SN}} \cdot \text{POC}_W}{DZ} + \frac{v_{\text{SP}} \cdot \text{AOC}_W}{DZ} - \frac{v_s \cdot \text{POC}_B}{DZ} + \frac{v_R \cdot \text{POC}_{\text{SUB}}}{DZ}$$

waarin:	$K_{\text{hyd},B}$	de hydrolyse snelheidsconstante van organische stof in de bodem (dag^{-1})
	DZ	de dikte van de actieve toplaag (m)
	POC_{SUB}	de POC concentratie in de sedimentonderlaag ($\text{g POC} \cdot \text{m}^{-3}$)
	v_{SN}	de sedimentatiesnelheid van organisch materiaal ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)
	v_{SP}	de sedimentatiesnelheid van algen ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)

De eerste term beschrijft de hydrolyse van particulier organische stof in de bodem. De tweede term brengt het verlies aan POC uit de toplaag door resuspensie in rekening. De derde en vierde term beschrijven de belasting van het sediment met organische stof door sedimentatie van detritus en algen. Overigens wordt de algengroei in de bodem niet gesimuleerd. Gesedimenteerde algen worden direct toegerekend aan de pool met particulier organisch materiaal. De laatste twee termen in vergelijking 18 beschrijven het pseudo-advectief transport tussen de sediment top- en onderlaag. De concentratie POC in de sedimentonderlaag, POC_{SUB} , wordt constant verondersteld en dient door de gebruiker te worden opgegeven.

Voor het DOC gehalte in de toplaag geldt:

$$[19] \quad \frac{d\text{DOC}_B}{dt} = -K_{d,\text{min},B} \cdot \text{DOC}_B + K_{\text{hyd},B} \cdot \text{POC}_B + \frac{E_{z0} \cdot \text{POR}}{0,5 \cdot DZ \cdot DZ} \cdot \left(\text{DOC}_W - \frac{\text{DOC}_B}{\text{POR}} \right) - \frac{E_{z2} \cdot (\text{DOC}_B - \text{DOC}_{\text{SUB}})}{0,5 \cdot DZ \cdot DZ} - \frac{v_r \cdot \text{DOC}_B}{DZ} + \frac{v_s \cdot \text{POR} \cdot \text{DOC}_W}{DZ} + \frac{v_r \cdot \text{DOC}_{\text{SUB}}}{DZ} - \frac{v_s \cdot \text{DOC}_B}{DZ}$$

waarin:	$K_{d,\text{min},B}$	de snelheidsconstante mineralisatie DOC sediment (dag^{-1})
	E_{z0}	de dispersieconstante grensvlak water-sediment ($\text{m}^2 \cdot \text{dag}^{-1}$)
	E_{z2}	de dispersieconstante grensvlak top- onderlaag ($\text{m}^2 \cdot \text{dag}^{-1}$)
	DOC_B	het opgelost organisch koolstof in de bodem ($\text{g DOC} \cdot \text{m}^{-3}$)
	DOC_{SUB}	het opgelost organisch koolstof in de sedimentonderlaag ($\text{g DOC} \cdot \text{m}^{-3}$)

10.2.6 Partitie

In het model vindt adsorptie plaats aan het organisch koolstof in opgeloste fase (DOC), het organisch koolstof in dood particulier materiaal (POC) en het organisch koolstof in levende algen (AOC). In figuur 10.2 zijn deze verdelingen aanschouwelijk gemaakt.

De verdeling van een verontreiniging over de verschillende vormen van koolstof wordt berekend met lineaire partitie. Hierbij wordt aangenomen, dat de concentraties in het lineaire deel van de adsorptie isotherm liggen. De helling van de adsorptie isotherm, de zogenaamde partiticoëfficiënt, kan dan gebruikt worden om de verdeling over de verschillende fracties te berekenen. Een tweede aanname is het uitgangspunt van een zich instantaan instellend adsorptie-evenwicht. Gezien de tijdschalen van de andere processen en de simulatieperiodes waarvoor het model meestal wordt gebruikt, is deze aanname gerechtvaardigd. Vandaar dat de volgende vergelijkingen voor de waterkolom kunnen worden afgeleid:

$$[20] \quad C_{W,DIS} = \frac{C_{W,TOT}}{1 + K_{P,DOC} \cdot DOC_W + K_{P,POC} \cdot POC_W + K_{P,AOC} \cdot AOC_W}$$

$$[21] \quad C_{W,DOC} = \frac{K_{P,DOC} \cdot DOC_W \cdot C_{W,TOT}}{1 + K_{P,DOC} \cdot DOC_W + K_{P,POC} \cdot POC_W + K_{P,AOC} \cdot AOC_W}$$

$$[22] \quad C_{W,POC} = \frac{K_{P,POC} \cdot POC_W \cdot C_{W,TOT}}{1 + K_{P,DOC} \cdot DOC_W + K_{P,POC} \cdot POC_W + K_{P,AOC} \cdot AOC_W}$$

$$[23] \quad C_{W,AOC} = \frac{K_{P,AOC} \cdot AOC_W \cdot C_{W,TOT}}{1 + K_{P,DOC} \cdot DOC_W + K_{P,POC} \cdot POC_W + K_{P,AOC} \cdot AOC_W}$$

waarin:	$C_{W,DIS}$	de concentratie opgeloste verontreiniging ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)
	$C_{W,DOC}$	de verontreiniging geadsorbeerd aan DOC ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)
	$C_{W,POC}$	de verontreiniging geadsorbeerd aan POC ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)
	$C_{W,AOC}$	de verontreiniging geadsorbeerd aan AOC ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)
	$C_{W,TOT}$	de totale verontreinigingsconcentratie in de waterkolom ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)
	$K_{P,DOC}$	de partiticoëfficiënt DOC ($\text{m}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)
	$K_{P,POC}$	de partiticoëfficiënt POC ($\text{m}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)
	$K_{P,AOC}$	de partiticoëfficiënt AOC ($\text{m}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)

Voor de toplaag van de bodem kan een zelfde set vergelijkingen worden afgeleid. In dat geval wordt de index W(water) vervangen door B(bodem). Met dien verstande dat voor de bodem alle termen met AOC in bovenstaande vergelijkingen vervallen. De algenbiomassa wordt immers niet gesimuleerd. Overigens wordt aangenomen, dat de partiticoëfficiënten in bodem en water aan elkaar gelijk zijn.

Ook voor de sedimentonderlaag gelden dezelfde vergelijkingen in dat geval wordt de index W vervangen door SUB. Op deze wijze kan volstaan worden met het opgeven van één vaste totaal concentratie aan verontreiniging in de onderlaag.

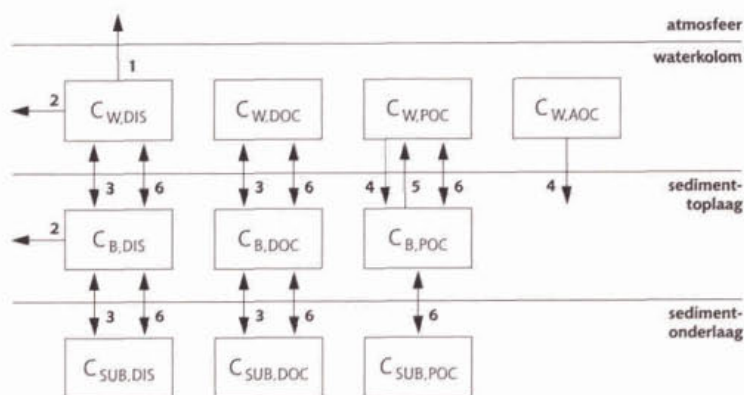
10.2.7 Balansvergelijkingen voor organische micro-verontreiniging

Figuur 10.2 geeft een overzicht van de transport- en stofprocessen in het model. Allereerst de opgeloste fractie, deze is onderhevig aan afbraak. De totale afbraak wordt beschreven als een eerste orde proces. Afhankelijk van het soort micro-verontreiniging, kan de stof worden afgebroken door biodegradatie, hydrolyse of fotolyse. In het model is alleen een snelheidsconstante K_{DC} gedefinieerd, die in voorkomende gevallen alle genoemde processen beschrijft. Afbraak vindt zowel in de waterkolom als in de sedimenttoplaag plaats.

Voor eventueel vluchtige verbindingen, wordt ook de uitwisseling tussen water en de atmosfeer beschreven. De stofoverdrachtsconstante K_L wordt constant verondersteld. Uitwisseling van zowel opgelost als aan DOC gebonden verontreiniging wordt beschreven met een diffusie-term. De diffusie vindt zowel plaats over het grensvlak water-toplaag als tussen de sedimenttoplaag en de sedimentonderlaag.

Tenslotte vindt er pseudo-advectief transport plaats. Alle onderscheiden vormen van de verontreiniging zijn hier aan dit transport onderhevig. De uitwisseling veroorzaakt door pseudo-advectie wordt beschreven met de gedefinieerde verplaatsingsnelheden van het grensvlak water-sediment (zie vergelijking 4).

Figuur 10.2 Schematisch overzicht van processen en transport in het model OMIVE.



- [1] Vervluchtiging, [2] Afbraak, [3] Diffusieve uitwisseling, [4] Sedimentatie, [5] Resuspensie, [6] Pseudo-advectie

Op basis van het hierboven geschetste concept zijn de balansvergelijkingen voor de micro-verontreiniging in de waterkolom en de bodem afgeleid. In deze vergelijkingen wordt uitgegaan van een adsorptie-evenwicht, dat zich instantaan instelt. Door deze aanname kan volstaan worden met het opstellen van massabalansen voor de totaal concentraties.

Voor de waterkolom geldt:

$$[24] \quad \frac{dC_{W,TOT}}{dt} = \frac{1}{DZ} (M_{res} - M_{sed} - M_{dif,1} + M_{psad,1} - M_{afb,1} - M_{verv} + M_{atm})$$

en voor de sedimenttoplaag:

$$[25] \quad \frac{dC_{B,TOT}}{dt} = \frac{1}{DZ} (M_{sed} - M_{res} + M_{dif,1} - M_{dif,2} - M_{psad,1} + M_{psad,2} - M_{afb,2})$$

- waarin:
- $C_{W,TOT}$ de totale concentratie van de verontreiniging in de waterkolom ($g \cdot m^{-3}$)
 - $C_{B,TOT}$ de totale concentratie van de verontreiniging in de waterkolom ($g \cdot m^{-3}$)
 - z de waterdiepte (m)
 - DZ de dikte van de actieve sedimenttoplaag (m)

De overige declaraties zijn weergegeven in tabel 10.1. Opgemerkt wordt, dat voor de concentraties in de sedimentonderlaag geen balans wordt bijgehouden. Deze concentraties zijn constant verondersteld en dienen door de gebruiker te worden opgegeven.

De in tabel 10.1 vermelde termen worden ook in het model uitgerekend en kunnen dus ook als zodanig apart worden uitgevoerd. Daarmee wordt de mogelijkheid geboden om per tijdstap het aandeel van de verschillende termen in de massabalans te bestuderen. Alle termen in de balans zijn gedefinieerd als een flux, dat wil zeggen, dat de eenheid in $g \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$ is. Als extra term in de balans voor de waterkolom is een bronterm toegevoegd. Deze kan door de gebruiker gebruikt worden voor het simuleren van een diffuse belasting.

Tabel 10.1 Overzicht van termen in de massabalansvergelijkingen voor water en sedimenttoplaag

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Atmosferische depositie	M_{atm}	F_{atm}
Vervluchtiging	M_{verv}	$\frac{K_L \cdot C_{W,DIS}}{z}$
Afbraak water	$M_{afb,1}$	$K_{DC} \cdot C_{W,DIS} \cdot z$
Afbraak toplaag	$M_{afb,2}$	$K_{DC} \cdot C_{B,DIS} \cdot DZ$
Resuspensie	M_{res}	$F_{res} \cdot \frac{C_{B,POC}}{SS_B}$
Sedimentatie	M_{sed}	$v_{sn} \cdot C_{W,POC} + v_{sp} \cdot C_{W,AOC}$
Diffusie water/toplaag	$M_{dif,1}$	$\frac{E_{z0} \cdot POR}{0,5 \cdot DZ} \cdot (C_{W,DIS} - \frac{C_{B,DIS}}{POR}) +$ $\frac{E_{z0} \cdot POR}{0,5 \cdot DZ} \cdot (C_{W,DOC} - \frac{C_{B,DOC}}{POR})$
Diffusie toplaag/onderlaag	$M_{dif,2}$	$\frac{E_{z2}}{0,5 \cdot DZ} \cdot (C_{B,DIS} - C_{SUB,DIS}) +$ $\frac{E_{z2}}{0,5 \cdot DZ} \cdot (C_{B,DOC} - C_{SUB,DOC})$
Pseudo-advectie water/toplaag	$M_{psad,1}$	$v_r \cdot (C_{B,DIS} + C_{B,DOC}) -$ $v_s \cdot POR \cdot (C_{W,DIS} + C_{W,DOC})$
Pseudo-advectie toplaag /onderlaag	$M_{psad,2}$	$-v_s \cdot C_{B,TOT} + v_r \cdot C_{SUB,TOT}$

10.2.8 Uitvoervariabelen

Behalve de uitvoer van de toestandsvariabelen kunnen een groot aantal in het model berekende grootheden als functie worden uitgevoerd. Een aantal mogelijk interessante grootheden worden in tabel 10.2 vermeld. Ook de termen in tabel 10.1 zijn als uitvoervariabelen op te vragen.

Tabel 10.2 Overzicht van een aantal grootheden, die als functie zijn uit te voeren.

Symbol	Omschrijving	Eenheid
P_{SSW}	Dichtheid zwevende stof waterkolom	$g \cdot m^{-3}$
P_{SSB}	Dichtheid vaste stof waterbodem	$g \cdot m^{-3}$
V_R	Pseudo-advectief transportsnelheid door resuspensie	$m \cdot dag^{-1}$
V_S	Pseudo-advectief transportsnelheid door sedimentatie	$m \cdot dag^{-1}$
$F_{SS,B}$	Fractie organische stof in de waterkolom	-
$F_{SS,W}$	Fractie organische stof in het sediment	-
$F_{S,POC}$	POC gehalte in vaste stof bodem	$g \text{ POC} \cdot g \text{ Stof}^{-1}$
$C_{W,DIS}$	Concentratie opgelost in waterkolom	$g \cdot m^{-3}$
$C_{W,DOC}$	Concentratie DOC geassocieerd in waterkolom	$g \cdot m^{-3}$
$C_{W,POC}$	Concentratie POC geassocieerd in waterkolom	$g \cdot m^{-3}$
$C_{W,AOC}$	Concentratie AOC geassocieerd in waterkolom	$g \cdot m^{-3}$
$C_{B,DIS}$	Concentratie opgelost in bodem	$g \cdot m^{-3}$
$C_{B,DOC}$	Concentratie DOC geassocieerd in bodem	$g \cdot m^{-3}$
$C_{B,POC}$	Concentratie POC geassocieerd in bodem	$g \cdot m^{-3}$
$C_{SUB,DIS}$	Concentratie opgelost in bodem onderlaag	$g \cdot m^{-3}$
$C_{SUB,DOC}$	Concentratie DOC geassocieerd in bodem onderlaag	$g \cdot m^{-3}$
C_{IW}	Concentratie opgelost (DIS + DOC) in poriewater	$g \cdot m^{-3}$
C_{SSW}	Gehalte in zwevend slib	$g \cdot kg^{-1}$
C_{SSB}	Gehalte in bodem slib	$g \cdot kg^{-1}$

Het gehalte in het zwevend en bodemslib wordt berekend uit:

$$[26] \quad C_{SSB} = \frac{1000 \cdot C_{B,POC}}{SS_B}$$

$$C_{SSW} = \frac{1000 \cdot C_{W,POC}}{SS_W}$$

De concentratie in het poriewater omvat zowel de opgeloste als de aan DOC gebonden verontreiniging en wordt berekend als:

$$[27] \quad C_{IW} = \frac{C_{B,DIS} \cdot C_{B,DOC}}{POR}$$

10.3 Benodigde invoer

In deze paragraaf wordt slechts de invoer beschreven, die specifiek is voor het model OMIVE. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding (EDS, 1995). Verder wordt voor specifiek aan het transport gerelateerde invoer verwezen naar hoofdstuk 1, getiteld het transport van conservatieve stoffen. Tabel 10.3 geeft een overzicht van de benodigde invoer.

Tabel 10.3

Benodigde invoer model OMIVE

Type	Naam	Bron	Typische waarde	
Initiële condities	Waterkolom	meting/schatting	streekspecifiek	
	$C_{W,TOT}$		$g.m^{-3}$	
	POC_W		$g POC.m^{-3}$	
	DOC_W		$g DOC.m^{-3}$	
	AOC_W		$g AOC.m^{-3}$	
		SS_W	$g SS.m^{-3}$	
		Sediment	meting/schatting	streekspecifiek
		DOC_B		$g DOC.m^{-3}$
		POC_B		$g POC.m^{-3}$
		$C_{B,TOT}$	$g.m^{-3}$	
DOC_{SUB}		(DOC in onderlaag)	meting	streekspecifiek
POC_{SUB}		(POC in onderlaag)		$g DOC.m^{-3}$
$C_{SUB,TOT}$	(micro-verontr. onderlaag)	$g POC.m^{-3}$		
			$g.m^{-3}$	
Randvoorwaarden	Systeemgrens	meting	streekspecifiek	
	$C_{W,TOT}$		$g.m^{-3}$	
	POC_W		$g POC.m^{-3}$	
	DOC_W		$g DOC.m^{-3}$	
	AOC_W		$g AOC.m^{-3}$	
		Puntlozingen	meting	streekspecifiek
	$C_{W,TOT}$	$g.m^{-3}$		
	POC_W	$g POC.m^{-3}$		
	DOC_W	$g DOC.m^{-3}$		
	AOC_W	$g AOC.m^{-3}$		
Parameters	a	Fractie POC die vrijkomt bij afsterving algen	literatuur ¹	0,5-1,0
	DZ	Dikte actieve toplaag sediment	meting/schatting	0,05-0,20 m
	E_z	Effectieve diffusieconstante	literatuur ⁵	$5 \cdot 10^{-5} m^2.dag^{-1}$
	FC	verhouding koolstof/droge stof	literatuur ^{1,3}	$0,52 g C.g Stof^{-1}$
	K_{PAOC}	Partiticoëfficiënt AOC	Literatuur ²	streekspecifiek
	K_{PDOC}	Partiticoëfficiënt DOC		
	K_{PPOC}	Partiticoëfficiënt POC		
	K_{DC}	Mineralisatie micro-verontreiniging	literatuur ²	streekspecifiek
	$K_{hyd,W}$	Hydrolysnelheid POC water	literatuur ^{1,3}	$10^{-2}-10^{-3} dag^{-1}$
	$K_{hyd,B}$	Hydrolysnelheid POC sediment		$10^{-4}-10^{-3} dag^{-1}$
	$K_{d,min,W}$	Mineralisatiesnelheid POC water	literatuur ^{1,3}	$10^{-2}-10^{-3} dag^{-1}$
	$K_{d,min,B}$	Mineralisatiesnelheid POC sediment		$10^{-4}-10^{-3} dag^{-1}$
	K_L	Stofoverdrachtsconstante	literatuur ³	streekspecifiek
	POR	Porositeit toplaag	meting/schatting	streekspecifiek
	ρ_{ano}	Dichtheid anorganische stof	literatuur	$2600 \cdot 10^3 g.m^{-3}$
	ρ_{org}	Dichtheid organische stof	literatuur	$1000 \cdot 10^3 g.m^{-3}$
	V_{SN}	Sedimentatiesnelheid organische stof	experimenteel/ literatuur ^{1,4}	$0,3 - 2,0 m.dag^{-1}$
	V_{SP}	Sedimentatiesnelheid algen		$0,05-0,1 m.dag^{-1}$
	V_{SS}	Sedimentatiesnelheid zwevende stof		$2-10 m.dag^{-1}$
Externe variabelen	D	Dispersieconstante	Zie hoofdstuk 1	streekspecifiek $m^2.s^{-1}$
	F_{res}	Resuspensieflux	Zie hoofdst. 4 & 5	$g SS.m^{-2}.dag^{-1}$
	F_{atm}	Diffuse bron microverontr.	massabalans	$g.m^{-2}.dag^{-1}$
	P_{AOC}	Productiesnelheid AOC	Zie hoofdst. 7 & 8	$g AOC.m^{-3}.dag^{-1}$

Bronnen: [1] Jorgensen and Gromiec (1989), [2] Jorgensen (1992), [3] Bowie et al. (1985), [4] Brown et al. (1987), [5] Portielje (1994).

10.3.1 Initiële condities

Voor de waterkolom zijn vijf toestandsvariabelen te definiëren. Voor elk van deze variabelen moet de toestand op tijdstip nul worden opgegeven. Veelal wordt op basis van metingen een schatting gemaakt van de initiële toestand. Voor complexe netwerken is dit echter vaak niet eenvoudig. In dergelijke gevallen kan door het uitvoeren van een inleidende simulatie een schatting van de initiële condities worden gemaakt. Hierbij kan gebruik worden gemaakt van de optie 'new initial conditions' in de scenario manager (zie hoofdstuk 1, paragraaf 1.3.1). De concentratie aan AOC_w kan worden geschat uit het chlorofyl-a gehalte, waarbij men een constante Koolstof/Chlorofyl verhouding in de algen aanneemt (Zie ook hoofdstuk 7 en 8). Het POC_w gehalte kan eventueel uit het gloeiverlies van het zwevende stof worden geschat.

Naast de toestandsvariabelen voor de waterkolom, zijn in dit model ook drie toestandsvariabelen voor de bodem gedefinieerd. Voor deze variabelen is een goede schatting van de initiële condities van groot belang. Daar de processen in de bodem en ook de uitwisseling met de bovenstaande waterkolom slechts zeer langzaam verlopen, zal een foutieve keuze van de beginconcentratie in de bodem lang doorwerken in de uitkomsten van een simulatie. Het is dan ook verstandig het verloop van de gesimuleerde concentratie van deze stoffen in de bodem goed te volgen. Als men veronderstelt dat het systeem in evenwicht is, wat het geval is na een jarenlange constante belasting, mogen de concentraties in de bodem niet sterk veranderen. Naast een verkeerde keuze van de initiële concentraties of belasting kan ook een verkeerde schatting van proces- of uitwisselingsnelheden aanleiding geven tot sterk verlopende concentraties in het sediment.

Tenslotte moet ook voor de concentraties DOC, POC en micro-verontreiniging in de sublaag een beginvoorwaarde worden opgegeven. Er wordt verondersteld dat deze gehalten constant blijven. In het model zijn deze aan geen enkel proces onderhevig. Eigenlijk hadden deze als externe variabele gedefinieerd kunnen worden. Toch zijn ze als toestandsvariabele opgenomen, doordat op deze wijze het makkelijker is om per sectie een waarde toe te kennen aan deze concentraties.

10.3.2 Randvoorwaarden

Zowel op de randen van het te simuleren systeem, als voor alle lozingen op het systeem dienen voor de vijf toestandsvariabelen van de waterkolom randvoorwaarden opgegeven te worden. Op de systeemgrens gebeurt dit vaak door op basis van metingen een schatting te maken. Indien onvoldoende meetgegevens voorhanden zijn, moet de systeemgrens nauwkeurig gedefinieerd worden. Deze grens dient zodanig gekozen te worden, dat de randvoorwaarden de resultaten van de berekeningen op het punt waarin men is geïnteresseerd niet beïnvloeden.

Puntlozingen worden in DUFLOW ook beschouwd als randvoorwaarden. Voor alle toestandsvariabelen moet de kwaliteit van de lozing worden opgegeven. Dit betekent dat aan al het water dat het systeem inkomt een kwaliteit moet worden toegekend. In principe komt het erop neer dat aan alle randvoorwaarden van het waterbewegingsmodel ook een kwaliteitsrandvoorwaarde moet worden toegekend.

Evenals voor de initiële condities kan het POC_w worden geschat uit het gloeiverlies van de zwevende stof. Het AOC_w gehalte berekent men uit het chlorofyl-a gehalte. Voor veel puntlozingen zal men echter kunnen aannemen, dat het chlorofylgehalte gelijk aan nul is.

10.3.3 Parameters

Het model OMIVE bevat een groot aantal parameters, waarvan er een aantal goed gedefinieerd zijn en waarvoor literatuurwaarden kunnen worden gebruikt. Voor de andere parameters geldt, dat ze sterk systeem- of stofafhankelijk zijn.

Parameters die stofspecifiek zijn, kunnen veelal worden gerelateerd aan de stofoverdracht van zuurstof. Voor deze stofoverdracht zijn een groot aantal (semi) empirische relaties met de stromingscondities en/of de windsnelheid bekend (zie hoofdstuk 3). Zie bijvoorbeeld (Rathbun and Tai, 1981) en Schwarzenbach et al. (1993):

$$[28] \quad \frac{K_{L,VOC}}{K_{L,O_2}} = \left[\frac{D_{VOC}}{D_{O_2}} \right]^n$$

waarin:	D_{VOC}, D_{O_2}	de diffusieconstanten voor de vluchtige organische micro-verontreiniging en zuurstof ($m^2 \cdot s^{-1}$).
	$K_{L,VOC}, K_{L,O_2}$	de stofoverdrachtconstanten voor de micro-verontreiniging en zuurstof ($m \cdot s^{-1}$)
	n	de empirisch bepaalde coëfficiënt (-)

Voor de waarde van de coëfficiënt n wordt veelal een waarde tussen 0,55 en 0,65 gevonden. Schwarzenbach et al. (1993) bevelen een waarde van 0,57 aan.

Tenslotte kan voor de genoemde diffusieconstante van de micro-verontreiniging een schatting worden verkregen met de Othmer-Thakar vergelijking (zie Schwarzenbach et al., 1993):

$$[29] \quad D = \frac{13,26 \cdot 10^{-9}}{\mu^{1,14} \cdot V^{0,589}}$$

waarin:	V	het moleculair volume ($cm^3 \cdot mol^{-1}$)
	μ	de viscositeit van water bij 25 °C (centipoise)

Vanwege de geringe vervluchtiging van veel micro-verontreinigingen wordt in het model met een constante waarde voor de K_L gewerkt. Indien voor een bepaalde stof de uitwisseling met de atmosfeer wel van belang is, kan men eventueel één van de empirische relaties voor de stofoverdracht van zuurstof in het model implementeren en met behulp van vergelijking 28 omrekenen naar een stofoverdrachtsconstante voor de micro-verontreiniging.

Ook partiticoëfficiënten zijn stofspecifieke constanten. Voor veel hydrofobe verbindingen kunnen deze worden gerelateerd aan de K_{OW} , de octanol/water partiticoëfficiënt, die voor veel verbindingen bekend is.

Er zijn drie verschillende processen, die een rol kunnen spelen bij de afbraak van organische micro-verontreinigingen. Zo zijn er verbindingen, die onder invloed van licht worden afgebroken of worden omgezet in andere, mogelijk ook toxische verbindingen. Bij deze zogenaamde fotolyse speelt naast de instraling aan het wateroppervlak ook de extinctie van licht een rol.

Een tweede proces is de zogenaamde hydrolyse, waarbij een verontreiniging reageert met water en een nieuwe verbinding met een hydroxylgroep wordt gevormd. De hydrolysesnelheid hangt vaak sterk af van de pH; zowel H^+ als OH^- kunnen in de hydrolyse reactie als katalysator optreden.

Tenslotte kunnen organische micro-verontreinigingen ook door bacteriën en schimmels worden afgebroken. Voor deze biologische degradatiesnelheid is het van belang, dat er voldoende organismen aanwezig zijn om de stof af te breken. Is dat niet het geval dan dient ook de groei van de bacteriën te worden beschreven.

In het model OMIVE wordt geen onderscheid gemaakt tussen de diverse verwijderingsprocessen. Er wordt slechts gewerkt met één snelheidsconstante, die de totale verwijdering beschrijft.

Voor een groot aantal stoffen kunnen specifieke stofeigenschappen worden gevonden in diverse handboeken, zoals het Handbook of Chemistry and Physics (Weast and Astle, 1980). Ook kunnen voor een groot aantal stoffen specifieke stofeigenschappen worden gevonden in AQUAPOL, een door het RIKZ, WL en de UVA ontwikkelde database. Waarden voor de sedimentatiesnelheden kunnen experimenteel worden verkregen (zie ook hoofdstuk 4 en 5).

10.3.4 Externe variabelen

In het model OMIVE worden drie externe variabelen gedefinieerd, dit zijn de netto resuspensie, de diffuse belasting vanuit de atmosfeer en de productiesnelheid van de algenbiomassa.

NETTO RESUSPENSIE

In situaties waarin over langere periodes netto resuspensie optreedt speelt de waarde van de concentraties in de onderlaag een rol van betekenis. In dat geval zal door opraving van materiaal POC, DOC en micro-verontreiniging uit de onderlaag aan de actieve toplaag worden toegevoegd. Dit levert een klein dilemma op, omdat het model deze gehalten in de sedimentonderlaag als constanten beschouwt. In het algemeen is het model echter niet erg gevoelig voor deze concentraties. Bovendien is de diffusie van aan DOC gebonden en opgeloste verontreiniging zeer langzaam, zodat de diffusieve uitwisseling naar de waterkolom nauwelijks een rol van betekenis speelt. Voor het schatten en of berekenen van resuspensiefluxen wordt verwezen naar de hoofdstukken 4 en 5.

DIFFUSE BELASTING

Voor veel organische micro-verontreinigingen geldt, dat de diffuse belasting een belangrijk aandeel heeft in de totale belasting van het systeem. Deze wordt onder meer gevormd door de atmosferische depositie. Voor een aantal stoffen zijn hierover door het landelijk meetnet lucht- en neerslagkwaliteit wel gegevens verkrijgbaar.

Naast atmosferische depositie spelen overigens voor veel stoffen ook andere bronnen een belangrijke rol. Bijvoorbeeld valt te denken aan uitloging van PAK's uit beschoeiingen, afvoer van neerslag uit stedelijk gebied en de belasting door scheepvaart. Het is vaak moeilijk een goede schatting te krijgen van de totale diffuse belasting. Een mogelijkheid om een eerste schatting te krijgen, is een massabalans over het totale systeem op te stellen. In dat geval wordt de diffuse belasting gelijk gesteld aan de restpost. Dit levert veelal geen nauwkeurige schatting op, daar alle fouten in de massabalans accumuleren in de restpost.

PRODUCTIESNELHEID VAN ALGENBIOMASSA

De productiesnelheid van algenbiomassa (AOC) wordt in het model niet beschreven

en dient door de gebruiker te worden opgegeven. Deze kan eventueel met één van de eutrofiëringmodellen worden berekend en als functie van de tijd worden ingevoerd.

10.4 Voorbeeld Vecht

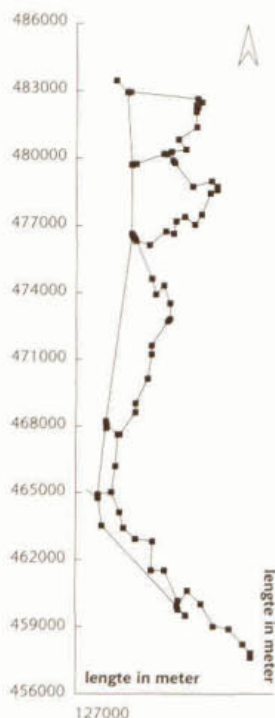
Dit voorbeeld is ontleend aan een modelstudie naar de Vecht. Doel is vooral te laten zien dat het model ook in complexe situaties kan worden gebruikt. Het systeem dat gesimuleerd wordt, is zowel complex wat betreft de waterhuishouding en waterbeweging als wat betreft de vele lozingen die er op plaatsvinden. Nadeel van een complex voorbeeld is, dat niet alle invoer in detail kan worden besproken en dat ook de resultaten niet zonder grondige studie van of voorkennis over het systeem kunnen worden geïnterpreteerd. Ten behoeve van dit illustratieve voorbeeld is de invoer dan ook vereenvoudigd. Zo wordt voor alle lozingen op het systeem gerekend met een constant debiet. Wel worden op de randen van het systeem in de tijd variërende debieten opgelegd. Ook voor de kwaliteit van deze lozingen is gewerkt met een tijdsvariërende concentratie. Overigens zijn dit gemiddelde concentraties.

10.4.1 Situatieschets

Figuur 10.3 geeft een schematisch overzicht van het watersysteemmodel Vecht. De Vecht stroomt van de Stad Utrecht in noordelijke richting en staat in open verbinding met het Amsterdam- Rijnkanaal. In de zomermaanden wordt in het Noorden vanuit het IJmeer water ingelaten. Als gevolg hiervan is gedurende deze periode in het noordelijk deel van de Vecht de stroomrichting van noord naar zuid. Terwijl in het zuidelijk deel, van Utrecht tot de Sluis bij Nigtevecht het water naar het noorden stroomt. Ten gevolge van de spui bij laag water op het Noordzeekanaal ontstaat er op de boezem van het Amsterdam-Rijnkanaal een pseudo-getijde beweging, die zich in de Vecht

voortplant en tot in de stad Utrecht merkbaar is. Op het systeem lozen een groot aantal RWZI's en slaan een groot aantal polders water uit. Daarnaast wordt er in de zomermaanden water vanuit de Vecht in een aantal polders ingelaten.

Als voorbeeld wordt het gedrag van fluorantheen (een PAK) gesimuleerd. De concentratie van deze stof in de waterfase ligt ruimschoots onder de norm, maar het gehalte in de bodem ligt wel boven de toetsingswaarde. Uit de massabalans blijkt, dat de belasting van de Vecht met fluorantheen grotendeels diffuus is. Bijna 18 % wordt aangevoerd door het inlaatwater. De polders dragen voor ca. 2 % bij aan de totale belasting. De resterende 80 % wordt veroorzaakt door overstortingen, atmosferische depositie, afgifte uit gecreoseerd hout en van vaartuigen. Naast de huidige situatie is met dit model onderzocht wat het effect zal zijn van het terugdringen van de diffuse belasting. Er is een simulatie uitgevoerd, waarbij wordt verondersteld dat de diffuse belasting met 50 % afneemt.



< Figuur 10.3 Watersysteemmodel Vecht

10.4.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

Er is een vrij gedetailleerde schematisering van de Vecht gemaakt. In principe zou voor het simuleren van organische micro-verontreinigingen wel met een minder gedetailleerde schematisering kunnen worden volstaan. Detail is toch ingebracht, omdat het model ook gebruikt is voor het bestuderen van de waterbeweging in het systeem en tevens toegepast is voor het simuleren van modellen, waarin snellere processen een rol spelen.

Bij de indeling in secties en knopen is rekening gehouden met de ligging van lozingen, knooppunten van waterwegen en met veranderingen in het dwarsprofiel. Hierbij is gebruik gemaakt van gedetailleerde lodingskaarten van Rijkswaterstaat, waarop om de 50 m een dwarsprofiel wordt aangegeven. Indien in een traject het oppervlak van een profiel meer dan 10-20 % varieerde is een nieuwe sectie gedefinieerd. Alleen het Amsterdam-Rijnkanaal is in het model met minder detail geschematiseerd.

In de verbindingen tussen de Vecht en het Amsterdam-Rijnkanaal zijn fictieve waterwerken (structures) opgenomen. Dit biedt de mogelijkheid om het Amsterdam-Rijnkanaal te isoleren van de Vecht. Eén van de verbindingen wordt in de wintermaanden met een sluis afgesloten. Het tijdstip van deze afsluiting kan in DUFLOW worden gesimuleerd met een trigger functie.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor de waterbeweging zijn bepaald met de optie 'new initial conditions' (zie hoofdstuk 1, paragraaf 1.3.1). Hiervoor is een periode van een maand doorgerekend. Op deze wijze is een schatting verkregen van het initiële peilverloop en de waterverdeling in het systeem.

De keuze van de initiële condities in de waterkolom is in dit geval niet zo belangrijk. Het model rekt snel in. Na enkele dagen is het effect van de keuze van de initiële condities reeds verdwenen. Voor de waterbodem echter is de keuze van de initiële condities wel van belang, want deze kunnen door de traagheid van de processen in de waterbodem lang hun effect hebben op de simulatieuitkomsten. In het model is gebruik gemaakt van een gegevens afkomstig van een uitgebreid onderzoek naar de waterbodem kwaliteit. In het kader hiervan is op een groot aantal punten de samenstelling van het sediment bepaald. Vervolgens is getracht om per sectie uit de resultaten van dit onderzoek een zo goed mogelijke schatting van de begintoestand te verkrijgen.

RANDVOORWAARDEN

De randen van het watersysteemmodel Vecht worden gevormd door het begin van de Vecht bij de Rode Brug (de Weerdsuis, knoop 2), de sluis bij Muiden (het IJmeer, knoop 55), het Amsterdam-Rijnkanaal bij Amsterdam (knoop 87) en het Amsterdam-Rijnkanaal bij Utrecht (knoop 70). Op knoop 2 en 87 is een debietrand opgelegd. Hierbij is gebruik gemaakt van meetgegevens afkomstig van daar geplaatste ADM's. Er is gerekend met daggemiddelde waarden. Op knoop 70 zijn gemeten waterpeilen als randvoorwaarde gebruikt. Aan de noordkant van het systeem zijn eveneens debieten opgelegd. Deze debieten zijn berekend uit geregistreerde peilen en schuifstanden, bij de sluis bij Muiden. Ook hier zijn daggemiddelde waarden gebruikt. De gegevens van de twee beschreven debietranden zijn voor het model in tijdseries opgenomen. Voor beide tijdseries geldt, dat slechts gegevens voor een periode van een jaar beschikbaar waren. Om toch vijf jaar te simuleren is vijf maal dezelfde dataset van een jaar als randvoorwaarde ingevoerd. Voor de lozingen van de RWZI's en industriële lozingen waren gemeten dagsommen beschikbaar. Het door de poldergemalen uitgeslagen water is berekend op basis van draaiuren en pompcapaciteiten. De hoeveelheid inlaatwater naar de polders toe is geschat op basis van een waterbalans. Hierin is gewerkt met jaargemiddelde waarden voor de debieten van alle lozingen.

Voor alle lozingen en systeemranden zijn voor de onderscheiden toestandsvariabelen concentraties als randvoorwaarden opgelegd. Waarden zijn afkomstig van een intensief meetprogramma. In het kader hiervan zijn een groot aantal lozingen over een periode van een jaar bemonsterd. Voor de meeste lozingen geldt een bemonsteringsfrequentie van eens per maand. Voor een aantal niet bemeten polders is op basis van bekende gegevens eens schatting gemaakt. Als randvoorwaarden zijn jaargemiddelde waarden gebruikt. In de gevallen dat de kwaliteit van een belangrijke lozing een duidelijke seizoensinvloed toonde, zijn de concentraties van de betreffende lozing als functie van de tijd ingevoerd. Het gemeten totaal organisch koolstofgehalte (TOC) wordt op basis van beschikbare gegevens over DOC en chlorofyl-a onderverdeeld in POC en AOC.

EXTERNE VARIABELEN

De waarde van de dispersie is voor het hele systeem constant verondersteld. Er is gebruik gemaakt van een waarde van $25 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Met deze waarde bleek het mogelijk de in het systeem optreden gradiënten van conservatieve stoffen redelijk te beschrijven (zie hoofdstuk 1).

Er is als micro-verontreiniging een diffuse belasting ingevoerd, die de atmosferische depositie representeert. De diffuse belasting is uit de nota Watersysteem Model Vecht (1993) gehaald. De productie van AOC is geschat op basis van resultaten van simulaties met het model EUTROF2A.

PARAMETERS

De waarden voor de meeste parameters zijn ontleend aan de literatuur. Het model is voor de huidige situatie gekalibreerd aan de hand van meetgegevens in het systeem. Voor een gedetailleerde beschrijving van de kalibratie van het model wordt verwezen naar Van Duin et al. (1994). Kalibratie van een dergelijk model is niet eenvoudig, vanwege de beperkte gegevens die voorhanden zijn. In eerste instantie is uit een massabalans een schatting gemaakt van de diffuse belasting, daar deze een van de belangrijkste ontbrekende invoergrootheden is. Bij de schatting is rekening gehouden met de accumulatie in het sediment door per sectie de sedimentaangroei te berekenen. De op deze wijze geschatte belasting is gebruikt als een indicatie voor de orde van grootte. Daar bij deze balans geen rekening werd gehouden met de afbraak en vervluchtiging van de microverontreiniging fluorantheen, zal de werkelijke accumulatie in het sediment lager zijn. In tweede instantie is dan ook door variatie van de diffuse belasting het model gekalibreerd op jaargemiddelde concentraties in de waterkolom, waarbij voor de snelheidsconstanten voor afbraak en uitwisseling met de atmosfeer literatuurwaarden zijn gebruikt. Vervolgens is gekeken naar het verloop van de gehalten in het sediment, waarbij de twee volgende aannamen gelden. Ten eerste moet het systeem in evenwicht zijn en ten tweede mag een concentratie in het sediment niet te veel veranderen. Dit resultaat werd bereikt door de partiticoëfficiënten te variëren.

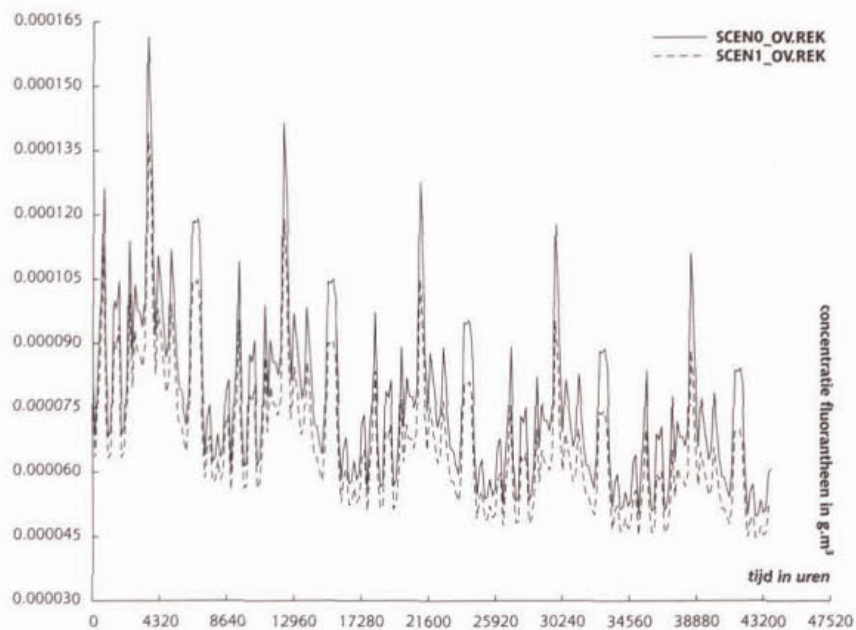
CALCULATION SETTINGS

Voor de waterbeweging is een tijdstap gebruikt van 2 uur. Deze is proefondervindelijk vastgesteld. Voor de kwaliteit kan met een tijdstap van 1 dag (24 uur) worden gerekend. Zeker indien lange periodes moeten worden doorgerekend verdient het aanbeveling na te gaan wat de grootst mogelijke tijdstap is. In dit geval is ook voor de kwaliteit de maximaal toegestane tijdstap proefondervindelijk vastgesteld. In dit geval wordt de maximaal toegestane tijdstap bepaald door de sedimentatiesnelheid van zwevende stof ($2,0 \text{ m} \cdot \text{dag}^{-1}$). Als uitvoerinterval is eens per week gekozen. De totale duur van de simulatie is 5 jaar. Daar het gaat om een simulatie over een lange periode is gedetailleerde uitvoer niet interessant. Bovendien wordt door de keuze van een groot uitvoerinterval de grootte van het uitvoerbestand beperkt. De grootte van dit bestand is in deze simulaties ook beperkt door slechts een beperkt aantal variabelen uit te voeren (te selecteren in Output variables in de calculation settings dialoog).

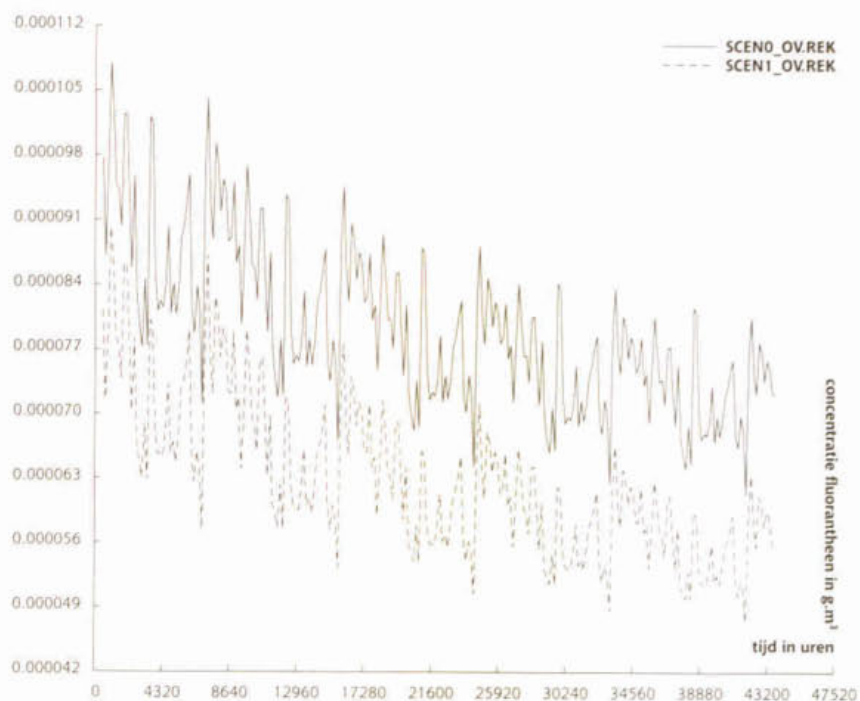
10.4.3 Resultaten

In figuur 10.5, 10.6 en 10.7 wordt voor een drietal locaties de totaalconcentratie micro-verontreiniging in de waterkolom weergegeven. De resultaten laten zien dat terugdringen van de diffuse belasting leidt tot een geringe verlaging van de totaal gehalten in de waterkolom. Stroomafwaarts neemt het effect van de gereduceerde belasting toe. Dit komt omdat bovenstrooms de invloed van Rijnwater overheersend is. Opmerkelijk is dat terugdringen van de externe belasting nauwelijks enig effect heeft op de concentratie in de bodem. Analyse van de fluxen laat zien dat in beide simulaties de sedimentatieflux van fluorantheen slecht een ondergeschikte rol speelt en dat transport in de waterkolom een overheersende rol speelt. Dit wordt verklaard uit het feit, dat ca. 92 % van het fluorantheen in opgeloste vorm aanwezig is. Accumulatie treedt daarom onder het huidige belastingsniveau niet meer op. Dit heeft als resultaat dat de concentraties in de bodem afnemen.

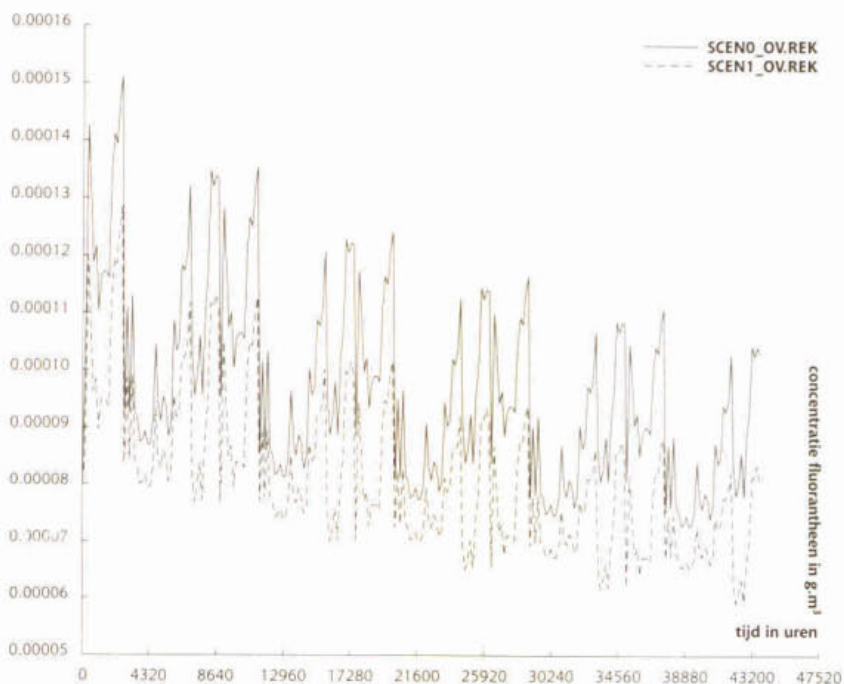
Figuur 10.5 De concentratie micro-verontreiniging in de waterkolom van sectie 10



Figuur 10.6 De concentratie micro-verontreiniging in de waterkolom voor sectie 30



Figuur 10.7 De concentratie micro-verontreiniging in de waterkolom van sectie 50



Literatuur

Bowie, G.L., et al, 1985, Rates, Constants and Kinetics. Formulations in Surface Water Quality Modelling, 2nd edition, EPA Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Athens, Georgia

Brown, L.C., et al, 1987, The Enhanced Stream Water Quality Models Qual2E and Qual2E-UNCAS: Documentation and User Manual, EPA Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Athens, Georgia

Duin, E.H.S. van, Portielje, R. en Aalderink, R.H., 1993, Watersysteem Model Vecht; Scenariostudies, Project Restauratie Plan Vecht, nota RPV 93.06b

Duin, E.H.S. van, Portielje, R. en Aalderink, R.H., 1994, Watersysteemmodel Vecht; modelontwikkeling en calibratie, Project Restauratie Plan Vecht, nota RPV 94.??

Jørgensen, S.E. en Gromiec, M.J., 1989, Mathematical Submodels in Water Quality Systems, Developments in Environmental Modelling 14, Elsevier, Amsterdam

Jørgensen, S.E., 1992, Modelling in Ecotoxicology, Developments in Environmental Modelling 16, Elsevier, Amsterdam

Portielje, R., 1994, Response of Shallow Aquatic Ecosystems to Different Nutrient Loading Levels, dissertatie 1845 Landbouw Universiteit Wageningen, Wageningen

Rathbun, R.E. and Tai, D.Y., 1981, Techniques for Determining the Volatilization Coefficients of Priority Pollutants in Streams, Water Research 15, 243-250.

Schwarzenbach, R.P. Gschwend, P.M. and Imboden, D.M., 1993, Environmental Organic Chemistry, 681 pp., Wiley and Sons, New York.

■ Bijlage 1

Procesbeschrijvingen OMIVE (OMIVE.MOD)

/*				*/
/*	MODEL OMIVE			*/
/*	Model voor organische micro-verontreinigingen			*/
/*	STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW			*/
/*				*/
/*	Landbouwniversiteit Wageningen			*/
/*	Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie			*/
/*	Postbus 8080			*/
/*	6700 DD Wageningen			*/
/*				*/
water	Cwtot	[0.000080]	g/m3	: concentratie micro-verontreiniging
water	POCw	[1.50]	g/m3	: particulier organische C waterkolom
water	SSw	[10.000]	g/m3	: zwevende stof waterkolom
water	DOCw	[0.50]	g/m3	: opgelost organisch C waterkolom
water	AOCw	[1.00]	g/m3	: algen koolstof
bottom	DOCb	[70.0]	g/m3	: opgelost organisch C toplaag
bottom	POCb	[50000]	g/m3	: particulier organisch C toplaag
bottom	DOCsub	[70.0]	g/m3	: opgelost organisch C sediment onderlaag
bottom	POCsub	[50000]	g/m3	: particulier organisch C sediment onderlaag
bottom	CBtot	[5.000]	g/m3	: micro-verontreiniging toplaag
bottom	Csubt	[5.67]	g/m3	: micro-verontreiniging sediment onderlaag
parm	alfa	[0.5]	gPOC/gAOC	: fractie POC die vrijkomt bij afsterving algen
parm	DZ	[0.10]	m	: dikte actieve toplaag sediment
parm	EZ	[0.00005]	m2/dag	: diffusie constante grensvlak sed/water
parm	FC	[0.52]	kg/kg	: verhouding C/droge stof algen en detritus
parm	KPAOC	[0.0049]	m3/g AOC	: partiticoëfficiënt AOC
parm	KPDOC	[0.0050]	m3/g DOC	: partiticoëfficiënt DOC
parm	KPPOC	[0.0049]	m3/g POC	: partiticoëfficiënt POC
parm	KdAOC	[0.05]	1/dag	: snelheidsconstante afsterving algen
parm	KDC	[0.00005]	1/dag	: snelheidsconstante afbraak micro water
parm	KHYDw	[0.01]	1/dag	: snelheidsconstante hydrolyse POC water
parm	KHYDb	[0.00005]	1/dag	: snelheidsconstante hydrolyse POC sediment
parm	KdMINw	[0.040]	1/dag	: snelheidsconstante mineralisatie water
parm	KdMINb	[0.015]	1/dag	: snelheidsconstante mineralisatie sediment
parm	KL	[1.92]	m/dag	: stofoverdrachtsconstante micro
parm	POR	[0.8]	-	: porositeit
parm	RHOANO	[2600000]	g/m3	: dichtheid anorganische stof
parm	RHOORG	[1000000]	g/m3	: dichtheid organische stof
parm	Vsn	[0.70]	m/dag	: sedimentatiesnelheid org. materiaal
parm	Vsp	[0.40]	m/dag	: sedimentatiesnelheid algen
parm	Vss	[1.5]	m/dag	: sedimentatie snelheid ss
xt	Fres	[20.0]	g/m2/dag	: resuspensie flux
xt	Fatm	[0.0]	g/m2/dag	: diffuse bron micro-verontreiniging
xt	PAOC	[1.0]	g/m2/dag	: AOC productiesnelheid
flow	Z	[2.000]	m	: depth

$$\{$$

$$SSb = RHOANO * ((1 - POR) - (POCb / (FC * RHOORG))) + (POCb / FC);$$

$$FCSSw = (POCw / FC) / SSw;$$

$$FCSSb = (POCb / FC) / SSb;$$

$$FOMW = FCSSw / RHOORG;$$

$$FSSw = (1 - FCSSw) / RHOANO;$$

$$FOMB = FCSSb / RHOORG;$$

$$FSSb = (1 - FCSSb) / RHOANO;$$

$RHOSSw = RHOORG*(FOMW/(FOMW + FSSw)) + RHOANO*(FSSw/(FOMW + FSSw));$
 $RHOSSb = RHOORG*(FOMB/(FOMB + FSSb)) + RHOANO*(FSSb/(FOMB + FSSb));$

$VR = Fres/(RHOSSb*(1-POR));$
 $VS = Vss*SSw/(RHOSSw*(1-POR));$

$FSPOC = POCB/SSb;$
 $EZ2 = 0.00001 + EZ*EXP(-50*DZ);$

$CsubDIS = Csubt/(1 + KPPOC*POCsub + KPDOC*DOCsub);$
 $CsubDOC = Csubt*KPDOC*DOCsub/(1 + KPPOC*POCsub + KPDOC*DOCsub);$

$CWDIS = Cwtot/(1 + KPDOC*DOCw + KPPOC*POCw + KPAOC*AOCw);$
 $CWDOC = Cwtot*KPDOC*DOCw/(1 + KPDOC*DOCw + KPPOC*POCw + KPAOC*AOCw);$
 $CWPOC = Cwtot*KPPOC*POCw/(1 + KPDOC*DOCw + KPPOC*POCw + KPAOC*AOCw);$
 $CWAOC = Cwtot*KPAOC*AOCw/(1 + KPDOC*DOCw + KPPOC*POCw + KPAOC*AOCw);$

$CBDIS = CBtot/(1 + KPDOC*DOCb + KPPOC*POCb);$
 $CBDOC = CBtot*KPDOC*DOCb/(1 + KPDOC*DOCb + KPPOC*POCb);$
 $CBPOC = CBtot*KPPOC*POCb/(1 + KPDOC*DOCb + KPPOC*POCb);$

$K1(AOCw) = -KdAOC*Vsp/Z;$
 $K0(AOCw) = PAOC/Z;$

$K1(POCw) = -KHYDw - Vsn/Z;$
 $K0(POCw) = KdAOC*alfa*AOCw + Fres*POCb/(SSb*Z);$

$K1(DOCw) = -KdMINw;$
 $K0(DOCw) = KHYDw*POCw + (1-alfa)*KdAOC*AOCw$
 $-EZ*POR*(DOCw-DOCb/POR)/(0.5*DZ*Z)$
 $+VR*DOCb/Z-VS*DOCw/Z;$

$K1(SSw) = -Vss/Z;$
 $K0(SSw) = Fres/Z + KdAOC*alfa*AOCw/FC - KHYDw*POCw/FC;$

$K1(POCb) = -KHYDb - Fres/(SSb*DZ)-VS/DZ;$
 $K0(POCb) = Vsn*POCw/DZ + Vsp*AOCw/DZ + VR*POCsub/DZ;$

$K1(DOCb) = -KdMINb;$
 $K0(DOCb) = KHYDb*POCb$
 $+EZ*POR*(DOCw-DOCb/POR)/(0.5*DZ*DZ)$
 $-EZ2*(DOCb-DOCsub)/(0.5*DZ*DZ)$
 $-VR*DOCb/DZ + VS*POR*DOCw/DZ$
 $+VR*DOCsub/DZ-VS*DOCb/DZ;$

$Matm = + Fatm;$
 $Msed = + Vsn*CWPOC + Vsp*CWAOC;$
 $Mres = + Fres*CBPOC/SSb;$
 $Mdif1 = + EZ*POR*(CWDIS-CBDIS/POR)/(0.5*DZ)$
 $+ EZ*POR*(CWDOC-CBDOC/POR)/(0.5*DZ);$
 $Mdif2 = + EZ2*(CBDIS-CsubDIS)/(0.5*DZ)$
 $+ EZ2*(CBDOC-CsubDOC)/(0.5*DZ);$
 $Mverv = + KL*CWDIS/Z;$
 $Mafb1 = + KDC*CWDIS*Z;$
 $Mafb2 = + KDC*CBDIS*DZ;$
 $Mpsad1 = + VR*(CBDIS + CBDOC)-VS*POR*(CWDIS + CWDOC);$
 $Mpsad2 = - VS*CBtot + VR*Csubt;$

$K0(Cwtot) = (-Msed + Mres - Mdif1 - Mverv - Mafb1 + Matm + Mpsad1)/Z;$
 $K0(CBtot) = (Msed - Mres + Mdif1 - Mdif2 - Mafb2 + Mpsad2 - Mpsad1)/DZ;$

$CSSb = 1000*CBPOC/SSb;$
 $CSSw = 1000*CWPOC/SSw;$
 $CIW = (CBDIS + CBDOC)/POR;$
 $}$

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

METAL

model voor zware metalen (As, Cu, Ni, Zn, Pb)

september 1997

hoofdstuk

II

R.H. Aalderink

*Landbouwuniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en
Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

II

Inhoudsopgave

II.1 METAL 5

- II.1.1 Toepassingsmogelijkheden 5
- II.1.2 Beperkingen 5

II.2 Procesbeschrijvingen 6

- II.2.1 Gesuspendeerde stof 6
- II.2.2 Pseudo-advectief transport 8
- II.2.3 Diffusieve uitwisseling 9
- II.2.4 Organische stof in de waterkolom 10
- II.2.5 Organische stof in het sediment 11
- II.2.6 Partitie 12
- II.2.7 Balansvergelijkingen voor zware metalen 14
- II.2.8 Uitvoervariabelen 16

II.3 Benodigde uitvoer 17

- II.3.1 Initiële condities 17
- II.3.2 Randvoorwaarden 19
- II.3.3 Parameters 19
- II.3.4 Externe variabelen 21

II.4 Voorbeeld Vecht 22

- II.4.1 Situatieschets 22
- II.4.2 Dufflow invoer 23
- II.4.3 Resultaten 25

Literatuur 28

bijlagen

Bijlage 1 Procesbeschrijvingen zware metalen (METAL.MOD) 29

11.1 METAL

Bij veel Nederlandse wateren worden waterkwaliteitsbeheerders geconfronteerd met verontreinigingen van zware metalen. Het model METAL beschrijft het gedrag van zware metalen. Het is gebaseerd op een model, dat is ontwikkeld in het kader van een onderzoek aan de Vecht.

De volgende processen worden in het model beschreven:

- Sorptie van metalen aan vaste stof (fractie < 16 mm), opgelost en particulier organisch materiaal (inclusief algen)
- Het effect van pH en Chloride wordt meegenomen voor de berekening van de partiticoëfficiënt, maar beide worden niet gemodelleerd. Wel bestaat de mogelijkheid om pH en Chloride op te geven als externe variabelen
- Neerslag van de zware metalen met sulfide in het sediment waar reducerende omstandigheden heersen
- Uitwisseling tussen bodem en waterkolom van opgelost en particulier organisch materiaal
- Uitwisseling tussen bodemsediment en waterkolom van zware metalen
- Netto sedimentatie en begraving van sediment materiaal.

Daar sorptie een belangrijke rol speelt in het gedrag van zware metalen, wordt ook het gedrag van sorbentia in detail beschreven. Zo worden er balansen bijgehouden van zwevende stof, particulier en opgelost organische stof, en algen.

11.1.1 Toepassingsmogelijkheden

Het model METAL is in principe geschikt voor alle metalen, mits de kinetiek van het metaal niet volledig anders is dan het gedrag van de metalen in dit model. Dit model beschrijft het lot van de metalen arseen (As), koper (Cu), lood (Pb), nikkel (Ni) en zink (Zn). Modelleren van andere belangrijke representanten zoals cadmium en kwik zijn hierin dus niet gemodelleerd. De beschrijving voor deze twee metalen verschilt dermate met de gemodelleerde metalen dat deze set vergelijkingen minder geschikt is. De toepassingen van het model liggen in de bestudering van de accumulatie van zware metalen in het bodemsediment op de lange termijn. Het model is geschikt om verschillende beheersscenarios uit te voeren.

Ook kan het model worden gebruikt om het effect na te gaan van wijzigingen in inlaatstrategieën, in verband met de verspreiding van verontreinigingen.

Een andere toepassing is het voorspellen van de snelheid en mate van belading van waterbodems. Dit is onder meer van belang voor de beoordeling van het nut van een waterbodemsanering. Het model kan bijvoorbeeld voorspellen of, en hoe snel, een waterbodem na sanering weer verontreinigd raakt.

11.1.2 Beperkingen

Het model gaat uit van een evenwicht tussen de opgeloste en gebonden zware metalen. Impliciet is aangenomen, dat het sorptie-evenwicht zich zeer snel instelt en reversibel is. Dit is meestal gerechtvaardigd, omdat de tijdschalen waarvoor het model wordt

toegepast enkele jaren tot decaden bedraagt.

Een ander uitgangspunt is, dat de sorptie van een metaal niet wordt gehinderd door een ander metaal. Er is geen competitie tussen metalen om een adsorptieplaats. Zo beschouwt het model alle adsorptieplaatsen als identiek aan elkaar en is in de sorptie term van bijvoorbeeld nikkel niet de partitie van de andere metalen meegenomen, terwijl deze metalen om dezelfde adsorptieplaatsen concurreren.

Naast sorptie aan detritus, anorganisch materiaal en opgeloste organische stof wordt ook de sorptie aan algen beschreven. De groei van algen wordt echter op een eenvoudige wijze berekend. Er wordt weliswaar een balans voor algen-koolstof bijgehouden, maar de groei van algen als functie van licht, temperatuur en nutriënten wordt niet beschreven. De productiesnelheid van algenbiomassa dient door de gebruiker zelf te worden opgegeven. Dit kan eventueel als functie van tijd en plaats. Bioaccumulatie en transport in de voedselketens door graas en predatie worden niet in het model meegenomen. Dit betekent dat, de interacties tussen het aquatisch ecosysteem en de lotgevallen van zware metalen niet kunnen worden gesimuleerd.

De resuspensie van zwevend stof wordt niet in detail beschreven. De waarde voor de resuspensieflux wordt door de gebruiker opgegeven als externe variabele. Hierdoor kan de gebruiker de resuspensie toch in de tijd laten variëren.

Ook wordt in het model geen rekening gehouden met de invloed van zuurstof op de redoxcondities en de sorptie karakteristiek van metalen. Reacties van bijvoorbeeld metalen en sulfide met zuurstof worden dus buiten beschouwing gelaten. Hierdoor beïnvloedt zuurstof in dit model niet de mobiliteit van de metalen of de beschikbaarheid van sulfide. Overigens is in dit model geen andere chemische speciatie van metaal mogelijk dan de verdeling over zwevend stof, particulier en opgelost organisch koolstof, en neerslag met sulfide, zodat de mobiliteit van metaal alleen door deze stoffen wordt veranderd.

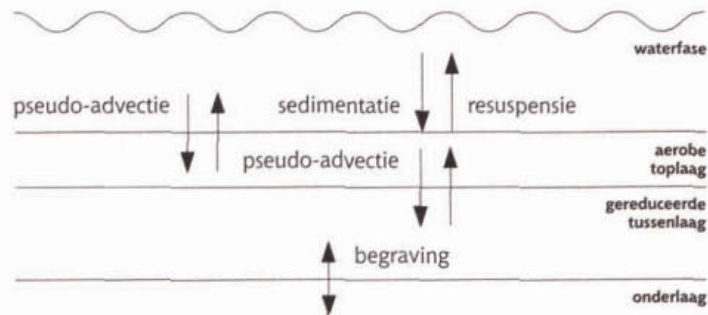
11.2 Procesbeschrijvingen

11.2.1 Gesuspendeerde stof

Voor de beschrijving van de sediment - water uitwisseling, het transport van particulier gebonden verontreinigingen en de verdeling van de verontreiniging over een opgeloste en een aan vaste stof gebonden fractie, dient ook het gedrag van zwevende stof in dit model te worden beschreven. Gekozen is voor een eenvoudige benadering. In het model voor zware metalen wordt, evenals in het model voor organische microverontreinigingen, het gedrag van één fractie zwevende stof in de waterkolom beschreven, waarbij ervan wordt uitgegaan dat sedimentatie en resuspensie simultaan optreden. Wel wordt er onderscheid gemaakt tussen organisch en anorganisch zwevend materiaal. De resuspensieflux zelf wordt in dit model niet berekend. Deze dient door de gebruiker te worden opgegeven. Voor de berekening hiervan wordt verwezen naar de hoofdstukken 4 en 5, waar modellen worden beschreven voor het gedrag van slib. De interactie met de bodem wordt evenals in het model voor organische microverontreinigingen beschreven middels de uitwisseling met een actieve toplaag. Ook in dit model wordt de dikte van deze laag constant verondersteld. Vergeleken met het model voor organische microverontreinigingen is de beschrijving van de sediment water uitwisseling wat complexer. Voor het gedrag van zware metalen wordt in de in de actieve

sediment toplaag onderscheid gemaakt tussen geoxideerde en gereduceerde laag. Dit omdat de aard van de adsorptie van metalen sterk afhangt van de redox condities. De geoxideerde toplaag is veelal dun en bevat slechts een klein gedeelte van de totale hoeveelheid metaal in het sediment, maar deze toplaag bepaalt wel de flux van het metaal over het grensvlak water- sediment. Onder de actieve toplaag bevindt zich een inerte onderlaag, waarin de concentraties constant worden verondersteld. In figuur 11.1 wordt het gehanteerde concept schematisch weergegeven.

Figuur 11.1 Gedrag van zwevend stof en interactie van zwevend stof met de bodem



WATERKOLOM

Voor het totaal zwevende stof (anorganisch plus organisch) in de waterkolom geldt de volgende balansvergelijking:

$$[1] \quad \frac{dSS_W}{dt} = \frac{-v_{ss} \cdot SS_W}{z} + \frac{F_{res}}{z} + \frac{K_{d,AOC} \cdot \alpha \cdot AOC_W}{FC} - \frac{K_{hyd,W} \cdot POC_W}{FC}$$

waarin:	SS_W	het totaal zwevend stofgehalte in de waterkolom ($g\ SS.m^{-3}$)
	AOC_W	aan algen gebonden organisch koolstof ($g\ AOC.m^{-3}$)
	POC_W	het particulier organisch koolstof (detritus) ($g\ POC.m^{-3}$)
	v_{ss}	de sedimentatiesnelheid totaal zwevende stof ($m.dag^{-1}$)
	F_{res}	de resuspensieflux totaal zwevende stof ($g.m^{-2}.dag^{-1}$)
	$K_{d,AOC}$	de snelheidsconstante afsterving algen (dag^{-1})
	$K_{hyd,W}$	de snelheidsconstante hydrolyse detritus (dag^{-1})
	α	de fractie POC die vrijkomt bij afsterving algen ($g\ POC.g\ AOC^{-1}$)
	FC	de verhouding koolstof/droge stof in algen en detritus ($g\ C.g\ SS^{-1}$)
	z	de waterdiepte (m)

De eerste twee termen beschrijven de sedimentatie en resuspensie van totaal zwevende stof. De derde term beschrijft de aanname, dat er zwevende stof wordt gevormd bij de afsterving van algen (detritusvorming). Tenslotte geeft de laatste term weer, dat het detritus onderhevig is aan afbraak.

BODEM

Het concept van de actieve toplaag met een constante dikte resulteert in een constante concentratie vaste stof in de toplaag. Uit dit concept volgt, dat voor de totaal concentratie vaste stof in de bodem geldt:

$$[2] \quad SS_B = \rho_{SS} \cdot (1-POR)$$

waarin: SS_B de vaste stofconcentratie in de bodem toplaag ($g\ SS.m^{-3}$)
 ρ_{SS} de dichtheid van vaste stof ($g.m^{-3}$)
 POR de porositeit van de toplaag (-)

Vanwege de variatie van het organische stofgehalte in de bodem (POC_B) door bijvoorbeeld mineralisatie, verandert de samenstelling van de vaste stof in de bodem. De variatie in de verdeling is van belang voor de berekening van de hoeveelheid stof, dat kan accumuleren in het systeem. Vergelijking 3 beschrijft daarom de verdeling over anorganisch en organische stof. De eerste term in deze vergelijking is gelijk aan de concentratie anorganisch stof, terwijl de tweede term het organisch stofgehalte beschrijft.

$$[3] \quad SS_B = \rho_{anorg} \cdot \left[(1-POR) - \frac{POC_B}{FC \cdot \rho_{org}} \right] + \frac{POC_B}{FC}$$

waarin: POC_B het gehalte particulier organisch koolstof in de bodem ($g\ POC.m^{-3}$)
 ρ_{anorg} de dichtheid van de anorganische stof ($g.m^{-3}$)
 ρ_{org} de dichtheid van organische stof ($g.m^{-3}$)

11.2.2 Pseudo-advectief transport

Door de ophoping van het sedimenterende materiaal verschuift het grensvlak water bodem in opwaartse richting. Door de veronderstelling dat de dikte van toplaag constant is, betekent dit echter ook, dat het grensvlak tussen de actieve toplaag en de onderlaag van het sediment verschuift. Dit houdt in, dat materiaal vanuit de toplaag naar de onderlaag wordt getransporteerd. Het omgekeerde geldt bij resuspensie. Hier wordt materiaal van de onderlaag getransporteerd naar de sedimenttoplaag. Dit geeft aanleiding tot de invoering van een tweetal transportsnelheden. Deze beschrijven het zogenaamde pseudo-advectief transport. De afleiding van pseudo-advectief transport volgt dus uit het concept van de actieve toplaag met een constante diepte.

De twee pseudo-advectief transportsnelheden worden gegeven door:

$$[4] \quad v_s = \frac{F_{sed}}{(1-POR) \cdot \rho_{SSW}}$$

$$v_r = \frac{F_{res}}{(1-POR) \cdot \rho_{SSB}}$$

waarin: v_s de pseudo-sedimentatie snelheid ($m.dag^{-1}$)
 v_r de pseudo-resuspensie snelheid ($m.dag^{-1}$)
 F_{sed} de sedimentatieflux, gelijk aan $V_{SS} \cdot SS_W$ ($g\ SS.m^{-2}.dag^{-1}$)
 F_{res} de resuspensieflux ($g\ SS.m^{-2}.dag^{-1}$)
 ρ_{SSW} de dichtheid van de zwevende stof in de waterkolom ($g.m^{-3}$)
 ρ_{SSB} de dichtheid van de vaste stof in de sediment toplaag ($g.m^{-3}$)

De twee genoemde dichtheden zijn variabel, doordat de samenstelling van de vaste stof kan veranderen. De volgende uitdrukkingen zijn afgeleid:

$$[5] \quad \rho_{SSW} = \frac{\rho_{org} \cdot F_{om,W}}{F_{om,W} + F_{SS,W}} + \frac{\rho_{anorg} \cdot F_{SS,W}}{F_{om,W} + F_{SS,W}}$$

$$[6] \quad \rho_{SSB} = \frac{\rho_{org} \cdot F_{om,B}}{F_{om,B} + F_{SS,B}} + \frac{\rho_{anorg} \cdot F_{SS,B}}{F_{om,B} + F_{SS,B}}$$

waarin:

$$[7] \quad F_{om,W} = \frac{F_{C_{SS,W}}}{\rho_{org}}$$

$$[8] \quad F_{SS,W} = \frac{1 - F_{C_{SS,W}}}{\rho_{anorg}}$$

$$[9] \quad F_{om,B} = \frac{F_{C_{SS,B}}}{\rho_{org}}$$

$$[10] \quad F_{SS,B} = \frac{1 - F_{C_{SS,B}}}{\rho_{anorg}}$$

Met $F_{C_{SS,W}}$ en $F_{C_{SS,B}}$ respectievelijk de fractie organische stof in de waterkolom en de fractie in de sedimenttoplaag. Hiervoor geldt:

$$[11] \quad F_{C_{SS,W}} = \frac{POC_W}{FC \cdot SS_W}$$

$$[12] \quad F_{C_{SS,B}} = \frac{POC_B}{FC \cdot SS_B}$$

11.2.3 Diffusieve uitwisseling

Naast uitwisseling gerelateerd aan resuspensie en sedimentatie, vindt er voor de opgeloste verontreinigingen ook diffusief transport plaats over het grensvlak water-sediment. Dit transportproces wordt beschreven met wet van Fick. Deze wet veronderstelt een rechtevenredigheid tussen de uitwisselingsflux Φ en de concentratiegradiënt. De wet van Fick luidt:

$$[13] \quad \Phi = E \cdot \frac{dC}{dz}$$

De concentratiegradiënt wordt in het model benaderd door het verschil tussen de concentratie in de waterkolom en het poriewater van de sedimenttoplaag, te delen door de halve dikte van de actieve sedimenttoplaag.

De evenredigheidsconstante (E) heeft hier het karakter van een diffusieconstante. Echter, in ondiep water is de waarde van E vaak groter dan de moleculaire diffusieconstante. Door het optreden van wind-geïnduceerde golven ontstaan drukgradiënten in het sediment, die het transport over het grensvlak water-bodem vergroten. Dit kan worden beschreven met een zogenaamde mechanische dispersieconstante. Deze

neemt exponentieel af met de diepte in het sediment. Portielje (1994) geeft hiervoor de volgende benadering:

$$[14] \quad E_z(h) = 1.0 \cdot 10^{-5} + E_{z,0} \cdot e^{(-50 \cdot h)}$$

waarin: $E_{z,0}$ de waarde van E_z aan het grensvlak water-sediment ($\text{m}^2 \cdot \text{dag}^{-1}$)
 h de afstand vanaf het grensvlak water-sediment (m)

Door in vergelijking 14 voor h de waarde van de dikte van de toplaag te substitueren kan de dispersiecoëfficiënt op het grensvlak van sediment top- en onderlaag worden berekend.

11.2.4 Organische stof in de waterkolom

Voor een aantal zware metalen geldt dat complexvorming met DOC een belangrijke rol speelt. Vandaar dat ook in het model voor zware metalen een balans voor organische koolstof wordt bijgehouden. In het model wordt onderscheid gemaakt tussen koolstof in levende algen (AOC), en de koolstof in dood organische materiaal (detritus). Het detritus wordt onderverdeeld in een opgeloste (DOC) en een particulaire fractie (POC).

Voor particulier organische stof, uitgedrukt als POC, in de waterkolom geldt:

$$[15] \quad \frac{d\text{POC}_W}{dt} = -K_{\text{hyd},W} \cdot \text{POC}_W - \frac{v_{SN} \cdot \text{POC}_W}{z} + K_{d,AOC} \cdot \alpha \cdot \text{AOC}_W + \frac{F_{\text{res}} \cdot \text{POC}_B}{z \cdot \text{SS}_B}$$

waarin: POC_W het particulier organisch koolstof in de waterkolom ($\text{g POC} \cdot \text{m}^{-3}$)
 POC_B het particulier organisch koolstof in de bodem ($\text{g POC} \cdot \text{m}^{-3}$)
 SS_B het gehalte totaal vaste stof in de bodem ($\text{g SS} \cdot \text{m}^{-3}$)
 v_{SN} de sedimentatiesnelheid van organisch materiaal ($\text{m} \cdot \text{dag}^{-1}$)
 $K_{\text{hyd},W}$ de hydrolyse van POC in de waterkolom (dag^{-1})
 $K_{d,AOC}$ de afstervingsnelheid van algen (dag^{-1})
 α de fractie POC vrijkomend na afsterving algen (-)

POC wordt gevormd bij de afbraak van algen en is onderhevig aan hydrolyse en sedimentatie. De resuspensie van POC is gerelateerd aan de resuspensie van totaal zwevende stof. Na vermenigvuldiging van de resuspensieflux met de fractie organische stof in de bodem ontstaat de resuspensie term van POC.

Het DOC gehalte in de waterkolom wordt berekend als:

$$[16] \quad \frac{d\text{DOC}_W}{dt} = -K_{d,\text{min},W} \cdot \text{DOC}_W + K_{\text{hyd},W} \cdot \text{POC}_W + (1-\alpha) \cdot K_{d,AOC} \cdot \text{AOC}_W - \frac{E_{z1} \cdot \text{POR}}{0,5 \cdot \text{DZ} \cdot z} \cdot \left(\frac{\text{DOC}_W - \text{DOC}_B}{\text{POR}} \right) + \frac{v_r \cdot \text{DOC}_B}{z} - \frac{v_s \cdot \text{DOC}_W}{z}$$

waarin:	DOC_B	het DOC gehalte in het sediment ($g\ DOC \cdot m^{-3}$)
	DOC_W	het DOC gehalte in de waterkolom ($g\ DOC \cdot m^{-3}$)
	$K_{d,min,W}$	de snelheidsconstante mineralisatie POC in het water (dag^{-1})
	E_{z1}	de diffusieconstante aan het grensvlak toplaag/tussenlaag ($m^2 \cdot dag^{-1}$)
	POR	de porositeit van de sedimenttoplaag (-)
	DZ	de dikte van de sedimenttoplaag (m)
	z	de waterdiepte (m)
	v_r	de pseudo-advectief transportsnelheid t.g.v. resuspensie ($m \cdot dag^{-1}$)
	v_s	de pseudo-advectief transportsnelheid t.g.v. sedimentatie ($m \cdot dag^{-1}$)
	$K_{d,AOC}$	de afstervingsnelheid van algen (dag^{-1})
	α	de fractie POC vrijkomend na afsterving algen (-)

DOC in de waterkolom wordt gevormd bij de hydrolyse van POC en bij de afsterving van algen. Er wordt aangenomen dat bij de afsterving van algen een fractie $1-\alpha$ als DOC vrijkomt. De rest wordt toegekend aan het POC. Net als POC is DOC onderhevig aan mineralisatie, maar anders dan bij POC vindt er ook diffusieve uitwisseling plaats van DOC met de sedimenttoplaag. De laatste twee termen in de bovenstaande vergelijking beschrijven het pseudo-advectief transport.

De vergelijking voor AOC wordt gegeven door:

$$[17] \quad \frac{dAOC}{dt} = -\frac{P_{AOC}}{z} - K_{d,AOC} \cdot AOC - \frac{v_{SP} \cdot AOC}{z}$$

waarin:	P_{AOC}	de productiesnelheid van AOC ($g\ AOC \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$)
	AOC	het organisch koolstofgehalte in algen ($g\ AOC \cdot m^{-3}$)
	v_{SP}	de sedimentatiesnelheid van algen ($m \cdot dag^{-1}$)

Het P_{AOC} representeert de productiviteit die (eventueel als functie van tijd en plaats) door de gebruiker kan worden opgegeven. In deze eenvoudige balansvergelijking wordt de groei van algen als functie van de omgevingscondities niet meegenomen.

11.2.5 Organische stof in het sediment

De balansvergelijking voor POC in de bodem wordt gegeven door:

$$[18] \quad \frac{dPOC_B}{dt} = -K_{hyd,B} \cdot POC_B + \frac{F_{res}}{DZ} \cdot \frac{POC_B}{SS_B} + \frac{v_{SN} \cdot POC_W}{DZ} + \frac{v_{SP} \cdot AOC_W}{DZ} - \frac{v_S \cdot POC_B}{DZ} + \frac{v_R \cdot POC_{SUB}}{DZ}$$

waarin:	$K_{hyd,B}$	de hydrolyse snelheidsconstante van organische stof in de bodem (dag^{-1})
	DZ	de dikte van de actieve toplaag (m)
	POC_{SUB}	de POC concentratie in de sedimentonderlaag ($g\ POC \cdot m^{-3}$)
	v_{SN}	de sedimentatiesnelheid van organisch materiaal ($m \cdot dag^{-1}$)
	v_{SP}	de sedimentatiesnelheid van algen ($m \cdot dag^{-1}$)

De eerste term beschrijft de hydrolyse van particulier organische stof in de bodem. De tweede term brengt het verlies aan POC uit de toplaag door resuspensie in rekening. De derde en vierde term beschrijven de belasting van het sediment met organische stof door sedimentatie van detritus en algen. Overigens wordt de algengroei in de bodem niet gesimuleerd. Gesedimenteerde algen worden direct toegerekend aan de pool met particulier organisch materiaal. De laatste twee termen in vergelijking 18 beschrijven het pseudo-advectief transport tussen de sediment top- en onderlaag. De concentratie POC in de sedimentonderlaag, POC_{SUB} , wordt constant verondersteld en dient door de gebruiker te worden opgegeven.

Voor het DOC gehalte in de toplaag geldt:

$$\begin{aligned}
 [19] \quad \frac{dDOC_B}{dt} = & -K_{d,min,B} \cdot DOC_B + K_{hyd,B} \cdot POC_B \\
 & + \frac{E_{z1} \cdot POR}{0,5 \cdot DZ \cdot DZ} \cdot \left(DOC_W - \frac{DOC_B}{POR} \right) - \frac{E_{z2}}{0,5 \cdot DZ \cdot DZ} \cdot (DOC_B - DOC_{SUB}) \\
 & - \frac{v_r \cdot DOC_B}{DZ} + \frac{v_s \cdot POR \cdot DOC_W}{DZ} + \frac{v_r \cdot DOC_{SUB}}{DZ} - \frac{v_s \cdot DOC_B}{DZ}
 \end{aligned}$$

waarin:

$K_{d,min,B}$	de snelheidsconstante mineralisatie DOC sediment (dag^{-1})
E_{z1}	de dispersieconstante grensvlak top-/tussenlaag ($m^2 \cdot dag^{-1}$)
E_{z2}	de dispersieconstante grensvlak top-/onderlaag ($m^2 \cdot dag^{-1}$)
DOC_B	het opgelost organisch koolstof in de bodem ($g \text{ DOC} \cdot m^{-3}$)
DOC_{SUB}	het opgelost organisch koolstof in de sedimentonderlaag ($g \text{ DOC} \cdot m^{-3}$)

11.2.6 Partitie

De verdeling van metaal over de vaste en de opgeloste fase is afhankelijk van het adsorptie evenwicht. Deze is onder andere afhankelijk van de zuurgraad en de redoxcondities. Zo vindt onder oxiderende omstandigheden veelal adsorptie van zware metalen aan Fe- en Mn (hydr)oxyden plaats, terwijl onder anaërobe, dus reducerende omstandigheden, en bij aanwezigheid van voldoende zwavel de oplosbaarheid van de metaalsulfiden het gedrag van de zware metalen bepaalt.

Om dit onderscheid in de modelberekeningen mee te kunnen nemen is het sediment in de verticaal opgedeeld in twee horizontale lagen. De bovenste is de aërobe laag waar oxiderende omstandigheden heersen. De onderste is de gereduceerde sedimentlaag (zie figuur 11.2)

In het model wordt een evenwicht verondersteld tussen de verschillende vormen waarin metalen kunnen voorkomen. Nadat de totale metaalconcentratie berekend is uit het transport, wordt de verdeling over de fracties berekend uit de onderlinge relaties en uit de partitiecöëfficiënten. In de waterkolom gelden voor de verdeling van een metaal drie vergelijkingen, dit zijn respectievelijk de adsorptie aan sediment, de oplossing in het water en de adsorptie aan DOC. De vergelijkingen zijn:

$$[20] \quad ME_{wSS} = \frac{ME_{wTOT} \cdot K_{MESSw} \cdot SSw}{1 + K_{MESSw} \cdot SSw + K_{MEDOC} \cdot DOCw}$$

$$[21] \quad ME_{wDOC} = \frac{ME_{wTOT} \cdot K_{ME}^{DOCw} \cdot DOC_w}{1 + K_{ME}^{SSw} \cdot SS_w + K_{ME}^{DOC} \cdot DOC_w}$$

$$[22] \quad ME_{wDIS} = \frac{ME_{wTOT}}{1 + K_{ME}^{SSw} \cdot SS_w + K_{ME}^{DOC} \cdot DOC_w}$$

waarin: ME_{wSS} de concentratie metaal geadsorbeerd aan zwevende stof ($g \cdot m^{-3}$)
 ME_{wDOC} de concentratie metaal geadsorbeerd aan DOC ($g \cdot m^{-3}$)
 ME_{wDIS} de concentratie opgelost metaal in de waterkolom ($g \cdot m^{-3}$)
 K_{ME}^{SSw} de partiticoëfficiënt voor metaal aan zwevende stof in de waterkolom ($m^3 \cdot g^{-1}$)
 K_{ME}^{DOC} de partiticoëfficiënt voor metaal aan DOC in de waterkolom ($m^3 \cdot g^{-1}$)

In de aërobe toplaag adsorbeert net als in de waterkolom metaal aan de sediment fase en ook hier speelt complexvorming met DOC, maar nu in het interstitiële water, een belangrijke rol. Voor de aërobe toplaag worden dezelfde vergelijkingen gehanteerd als voor de waterkolom. In vergelijking 20 tot en met 22 wordt in de naam van de variabelen het subscript W vervangen door S.

De partiticoëfficiënt voor de sediment fase wordt op basis van droge stof berekend uit de CEC (cation exchange capacity in $eq \cdot kg^{-1}$) van de bodemdeeltjes en de partiticoëfficiënt op basis van equivalente adsorptieplaatsen. De CEC wordt berekend als functie van het organische stof gehalte ($F_{C_{SS,B}}$) en de fractie van de deeltjes met een diameter kleiner dan $16 \mu m$ (F_{BX}) (Ministerie van Volkshuisvesting, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer, 1993):

$$[23] \quad CEC = 0.045 \cdot F_{C_{SS,B}}^{0.7} + 0.0045 \cdot F_{BX}$$

De lutumfractie F_{BX} kan als parameter worden opgegeven en wordt voor het hele systeem constant verondersteld. De organische stof fractie wordt per tijdstap opnieuw berekend uit het POC gehalte in het sediment (vergelijking 18). De partiticoëfficiënt wordt verder nog gecorrigeerd voor pH en saliniteit (Cl):

$$[24] \quad K_{ME}^{SSb} = K_{ME}^{SS'} \cdot CEC \cdot 10^{a \cdot pH, B} \cdot 10^{b \cdot Cl}$$

waarin: K_{ME}^{SSb} de partitie-coëfficiënt van Metaal aan bodemmateriaal ($m^3 \cdot [g \text{ SSb}]^{-1}$)
 $K_{ME}^{SS'}$ de partitie-coëfficiënt op basis van equivalente adsorptieplaatsen ($l \cdot [eq \times 10^{-6}]^{-1}$)

In principe worden vergelijking 20 tot en met 22 ook voor de gereduceerde tussenlaag en de inerte onderlaag gebruikt. Behalve als het sulfidegehalte in het interstitiële water een zekere grenswaarde overschrijdt. In dat geval worden sulfide precipitaten gevormd en wordt de verdeling berekend volgens:

$$[25] \quad ME_{redSS} = ME_{redT} - [ME_{redDIS} + ME_{redDOC}]$$

$$[26] \quad M_{\text{EredDOC}} = M_{\text{EredDIS}} \cdot K_{\text{ME}} \text{DOC} \cdot \text{DOC}_B$$

$$[27] \quad M_{\text{EredDIS}} = M_{\text{Esulf}}$$

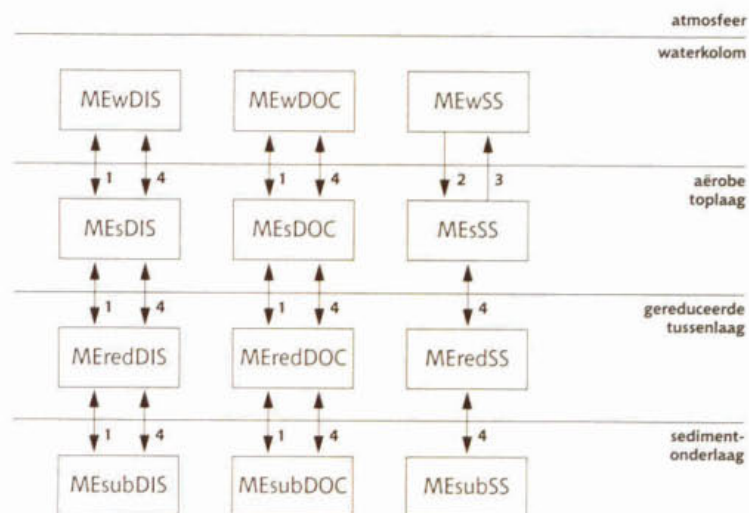
waarin: M_{Esulf} de oplosbaarheidsconstante sulfide ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)

Voor arseen speelt precipitatie met sulfide geen rol van betekenis. Voor dit metaal is dit proces dan ook niet meegenomen.

11.2.7 Balansvergelijkingen voor zware metalen

Figuur 11.2 geeft een overzicht van de transportprocessen in het model. Uitwisseling van zowel opgelost als aan DOC gebonden metaal wordt beschreven met een diffusie-term. De diffusie vindt plaats over alle drie de grenslagen in het systeem. Hetzelfde geldt ook voor het pseudo-advectief transport, dat ten gevolge van netto sedimentatie of netto resuspensie ontstaat. Door de pseudo-advectie verschuift de grenslaag. Pseudo-advectie is ook gebruikt voor de metalen die aan het sediment zijn geadsorbeerd. Dit uitwisselingsproces geldt echter niet voor het grensvlak waterkolom-sedimenttoplaag. Tenslotte wordt over het grensvlak tussen de waterkolom en de sedimenttoplaag de uitwisseling van aan zwevende stof gebonden metalen beschreven, deze uitwisseling wordt gecontroleerd door sedimentatie en resuspensie.

Figuur 11.2 Schematisch overzicht van processen en transport in het model METAL.



[1] Diffusieve uitwisseling, [2] Sedimentatie, [3] Resuspensie, [4] Pseudo-advectie

Op basis van het hierboven geschetste concept zijn de balansvergelijkingen voor de micro-verontreiniging in de waterkolom en de bodem afgeleid. Daar wordt uitgegaan van een adsorptie evenwicht, dat zich instantaan instelt, kan volstaan worden met het opstellen van massabalansen voor de totaal concentraties. De verdeling over de verschillende fracties geschiedt vervolgens per tijdstap naar de vergelijkingen 20 tot en met 22.

Voor de waterkolom geldt:

$$[28] \quad \frac{dMEwTOT}{dt} = \frac{1}{z} (M_{res} - M_{sed} - M_{dif,1} + M_{psad,1} + M_{atm})$$

De balans voor de aërobe sediment toplaag wordt gegeven door:

$$[29] \quad \frac{dMEsTOT}{dt} = \frac{1}{DZ1} (M_{sed} - M_{res} + M_{dif,1} - M_{dif,2} - M_{psad,1} + M_{psad,2})$$

en voor de gereduceerde tussenlaag geldt:

$$[30] \quad \frac{dMEredT}{dt} = \frac{1}{DZ2} (M_{dif,2} - M_{dif,3} - M_{psad,2} + M_{psad,3})$$

Voor de concentraties in de sedimentonderlaag wordt geen balans bijgehouden. Deze concentraties worden constant verondersteld en dienen door de gebruiker te worden opgegeven. In tabel 11.1 worden de verschillende termen in de balansvergelijking uitgeschreven. Ook in het model worden deze uitgerekend en kunnen dus ook als zodanig apart worden uitgevoerd. Daarmee wordt de mogelijkheid geboden om per tijdstap het aandeel van de verschillende termen in de massabalans te bestuderen. Alle termen in de balans zijn gedefinieerd als een flux, dat wil zeggen, dat de eenheid $g \cdot m^{-2} \cdot dag^{-1}$ is. Als extra term in de balans voor de waterkolom is een bronterm toegevoegd. Deze kan door de gebruiker worden opgegeven en gebruikt worden voor het simuleren van een diffuse belasting.

Tabel 11.1 Overzicht van termen in de massabalansvergelijkingen voor water- en sedimentlagen.

Proces	Naam functie variabele	Vergelijking
Diffuse bron	M_{atm}	ME_{atm}
Resuspensie	M_{res}	$\frac{F_{res} \cdot ME_{SS}}{SS_B}$
Sedimentatie	M_{sed}	$v_{ss} \cdot ME_{wSS}$
Diffusie water/ aërobe toplaag	$M_{dif,1}$	$\frac{E_{z,0} \cdot POR}{0,5 \cdot DZ1} \cdot \left(ME_{wDIS} - \frac{ME_{sDIS}}{POR} \right) +$ $\frac{E_{z,0} \cdot POR}{0,5 \cdot DZ1} \cdot \left(ME_{wDOC} - \frac{ME_{sDOC}}{POR} \right)$
Diffusie aërobe toplaag/ gereduceerde sublaag	$M_{dif,2}$	$\frac{E_{z,1}}{0,5 \cdot DZ} \cdot (ME_{sDIS} - ME_{redDIS}) +$ $\frac{E_{z,1}}{0,5 \cdot DZ} \cdot (ME_{sDOC} - ME_{redDOC})$
Diffusie gereduceerde sublaag/ inerte onderlaag	$M_{dif,3}$	$\frac{E_{z,2}}{0,5 \cdot DZ2} \cdot (ME_{redDIS} - ME_{subDIS}) +$ $\frac{E_{z,2}}{0,5 \cdot DZ2} \cdot (ME_{redDOC} - ME_{subDOC})$
Pseudo-advectie water/aërobe toplaag	$M_{psad,1}$	$v_r \cdot (ME_{sDIS} + ME_{sDOC}) -$ $v_s \cdot POR \cdot (ME_{wDIS} + ME_{wDOC})$
Pseudo-advectie aërobe toplaag/ gereduceerde sublaag	$M_{psad,2}$	$v_r \cdot ME_{resT} - v_s \cdot ME_{sT}$
Pseudo-advectie gereduceerde sublaag/inerte onderlaag	$M_{psad,3}$	$-v_s \cdot ME_{redT} + v_r \cdot ME_{subT}$

11.2.8 Uitvoervariabelen

Behalve de uitvoer van de toestandsvariabelen kunnen een groot aantal in het model berekende grootheden als functie worden uitgevoerd. Een aantal mogelijk interessante grootheden worden in tabel 11.2 vermeld. Ook de termen in tabel 11.1 zijn als uitvoervariabelen op te vragen.

Tabel 11.2 Overzicht van een aantal grootheden, die als functie zijn uit te voeren.

Symbol	Omschrijving	Eenheid
pSSW	Dichtheid zwevende stof waterkolom	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
pSSB	Dichtheid vaste stof waterbodem	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
V_R	Pseudo-advectief transportsnelheid t.g.v. resuspensie	$\text{m}\cdot\text{dag}^{-1}$
V_S	Pseudo-advectief transportsnelheid t.g.v. sedimentatie	$\text{m}\cdot\text{dag}^{-1}$
FC_{SS,B}	Fractie organische stof in de waterkolom	-
FC_{SS,W}	Fractie organische stof in het sediment	-
FSPOC	POC gehalte in vaste stof bodem	$\text{g POC}\cdot\text{g Stof}^{-1}$
MEwDIS	Concentratie metaal opgelost in waterkolom	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEwDOC	Concentratie metaal DOC geassocieerd in waterkolom	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEwSS	Concentratie metaal SS geassocieerd in waterkolom	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEsDIS	Concentratie metaal opgelost in aërobe toplaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEsDOC	Concentratie metaal DOC geassocieerd in aërobe toplaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEsSS	Concentratie metaal SS geassocieerd in aërobe toplaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEredDIS	Concentratie metaal opgelost in gereduceerde tussenlaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEredDOC	Concentratie metaal DOC geassocieerd met de gereduceerde tussenlaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
MEredSS	Concentratie metaal SS geassocieerd in gereduceerde tussenlaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
ME_{DIS}W	Concentratie metaal opgelost (DIS + DOC) in waterkolom	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
ME_{DIS}S	Concentratie metaal opgelost (DIS + DOC) in poriewater van de aërobe toplaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
ME_{DIS}RED	Concentratie metaal opgelost (DIS + DOC) in poriewater van de gereduceerde tussenlaag	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
ME_{SS}W	Gehalte metaal in zwevend slib	$\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$
ME_{SS}S	Gehalte metaal in bodemslib van aërobe toplaag	$\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$
ME_{SS}RED	Gehalte metaal in bodem slib van gereduceerde tussenlaag	$\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$

Het gehalte in het zwevend- en bodemslib wordt berekend uit:

$$\begin{aligned}
 [31] \quad \text{ME}_{\text{SS}} &= \frac{1000 \cdot \text{ME}_{\text{sSS}}}{\text{SS}_{\text{B}}} \\
 \text{ME}_{\text{SSRED}} &= \frac{1000 \cdot \text{ME}_{\text{redSS}}}{\text{SS}_{\text{B}}} \\
 \text{ME}_{\text{SSW}} &= \frac{1000 \cdot \text{ME}_{\text{wSS}}}{\text{SS}_{\text{W}}}
 \end{aligned}$$

De concentratie in het poriewater omvat zowel de opgeloste als de aan DOC gebonden verontreiniging. Er onder staat de vergelijking voor het opgeloste of geadsorbeerde metaal aan DOC in de waterkolom. De concentraties worden berekend als:

$$\begin{aligned}
 [32] \quad \text{ME}_{\text{DIS}} &= \frac{\text{ME}_{\text{sDIS}} + \text{ME}_{\text{sDOC}}}{\text{POR}} \\
 \text{ME}_{\text{DISRED}} &= \frac{\text{ME}_{\text{redDIS}} + \text{ME}_{\text{redDOC}}}{\text{POR}} \\
 \text{ME}_{\text{DISW}} &= \text{ME}_{\text{wDIS}} + \text{ME}_{\text{wDOC}}
 \end{aligned}$$

11.3 Benodigde invoer

In deze paragraaf wordt slechts de invoer beschreven, die specifiek is voor het model METAL. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding (EDS, 1995). Verder wordt voor specifiek aan het transport gerelateerde invoer verwezen naar hoofdstuk 1, Conservatieve stof. Tabel 11.3 geeft een overzicht van de benodigde invoer.

11.3.1 Initiële condities

Voor de waterkolom zijn vijf toestandsvariabelen te definiëren. Voor elk van deze variabelen moet de toestand op tijdstip nul worden opgegeven. Veelal wordt op basis van metingen een schatting gemaakt van de initiële toestand. Voor complexe netwerken is dit echter vaak niet eenvoudig. In dergelijke gevallen kan door het uitvoeren van een inleidende simulatie een schatting van de initiële condities worden gemaakt. Hierbij kan gebruik worden gemaakt van de optie 'new initial conditions' (zie Hoofdstuk 1, paragraaf 1.3.1). De concentratie aan AOC_w kan worden geschat uit het chlorofyl-a gehalte, waarbij men een constante Koolstof/Chlorofyl verhouding in de algen aanneemt (Zie ook Hoofdstuk 7 en 8). Het POC_w gehalte kan eventueel uit het gloeiverlies van het zwevende stof worden geschat.

Naast de toestandsvariabelen voor de waterkolom zijn in dit model ook drie toestandsvariabelen voor de bodem gedefinieerd. Voor deze variabelen is een goede schatting van de initiële condities van groot belang. Daar de processen in de bodem en ook de uitwisseling met de bovenstaande waterkolom slechts zeer langzaam verlopen, zal een foutieve keuze van de beginconcentratie in de bodem lang doorwerken in de uitkomsten van een simulatie. Het is dan ook verstandig het verloop van de gesimuleerde concentratie van deze stoffen in de bodem goed te volgen. Indien men veronderstelt dat het systeem in evenwicht is, wat het geval is na een jarenlange constante belasting, mogen de concentraties in de bodem niet sterk veranderen. Naast een verkeerde keuze van de initiële concentraties of belasting kan ook een verkeerde schatting van proces- of uitwisselingssnelheden aanleiding geven tot sterk verlopende concentraties in het sediment.

Tenslotte moet ook voor de concentraties DOC, POC en de zware metalen in de sublaag een beginvoorwaarde worden opgegeven. Er wordt verondersteld dat deze gehalten constant blijven. In het model zijn deze aan geen enkel proces onderhevig. Eigenlijk hadden deze als externe variabele gedefinieerd kunnen worden. Toch zijn ze als toestandsvariabelen opgenomen, doordat op deze wijze het makkelijker is om per sectie een waarde toe te kennen aan deze concentraties. Dit geldt ook voor de variabele S, het totaal anorganisch zwavel gehalte in de bodem. Het totaal anorganisch zwavel wordt slechts gebruikt om vast te stellen of de metaalsulfidevorming in de gereduceerde sublaag van belang is. Indien het totaal S gehalte hoger is dan een zekere grenswaarde, wordt aangenomen, dat de concentratie opgelost metaal wordt bepaald door het oplosbaarheidsproduct van het metaalsulfide. In het model wordt een vaste grenswaarde van 3.0 g S/kg sediment aangehouden.

Tabel 11.3

Benodigde invoer model METAL

Type	Naam	Bron	Typische waarde			
Initiële condities	Waterkolom	meting/schatting	systeemspecifiek			
	ME _W TOT (As, Cu, Pb, Zn, Ni)			g ME.m ⁻³		
	POC _W			g POC.m ⁻³		
	DOC _W			g DOC.m ⁻³		
	AOC _W			g AOC.m ⁻³		
	SS _W			g SS.m ⁻³		
	Sediment			meting/schatting	systeemspecifiek	
	ME _S TOT (As, Cu, Pb, Zn, Ni)					g ME.m ⁻³
	ME _{red} T					g ME.m ⁻³
	ME _{sub} T					g ME.m ⁻³
	DOC _B					g DOC.m ⁻³
	POC _B					g POC.m ⁻³
	DOC _{SUB}					g DOC.m ⁻³
	POC _{SUB}					g POC.m ⁻³
S	g S.m ⁻³					
Randvoorwaarden	Systeemgrens	meting/schatting	systeemspecifiek			
	ME _W TOT (As, Cu, Pb, Zn, Ni)			g.m ⁻³		
	POC _W			g POC.m ⁻³		
	DOC _W			g DOC.m ⁻³		
	AOC _W			g AOC.m ⁻³		
	SS _W			g SS.m ⁻³		
	Puntlozingen			meting	systeemspecifiek	
	C _W TOT					g.m ⁻³
	POC _W					g POC.m ⁻³
	DOC _W					g DOC.m ⁻³
AOC _W	g AOC.m ⁻³					
Parameters	α	Fractie POC die vrijkomt bij afsterving algen	literatuur ¹	0.5-1.0		
	DZ1	Dikte aërobe top laag sediment	meting/schatting	0.05-0.02 m		
	DZ2	Dikte gereduceerde tussenlaag sediment	meting/schatting	0.05-0.02 m		
	Ez	Effectieve diffusieconstante	literatuur ⁵	5.10 ⁻⁵ m ² .dag ⁻¹		
	FC	koolstof/droge stof verhouding	literatuur ^{1,3}	0.52 g C.g Stof ⁻¹		
	FWX	Percentage zwevende deeltjes < 16 μm		systeemspecifiek		
	FBX	Percentage sediment deeltjes < 16 μm		systeemspecifiek		
	MESulf	Constante concentratie opgelost metaal bij voldoende anorganische S	literatuur	zie tabel 11.4		
	K _{ME} SSW	Partiticoëfficiënt aan zwevende stof in de waterkolom	literatuur	zie tabel 11.7		
	K _{ME} DOC	Partiticoëfficiënt aan DOC	literatuur	zie tabel 11.5		
	K _{ME} SS	Partiticoëfficiënt op basis van adsorptie equivalenten	literatuur	zie tabel 11.6		
	K _{hyd,W}	Hydrolysesnelheid POC water	literatuur ^{1,3}	10 ⁻² -10 ⁻³ dag ⁻¹		
	K _{hyd,B}	Hydrolysesnelheid POC sediment		10 ⁻⁴ -10 ⁻³ dag ⁻¹		
	K _{d,min,W}	Mineralisatiesnelheid POC water	literatuur ^{1,3}	10 ⁻² -10 ⁻³ dag ⁻¹		
	K _{d,min,B}	Mineralisatiesnelheid POC sediment		10 ⁻⁴ -10 ⁻³ dag ⁻¹		
	POR	Porositeit top laag	meting/schatting	systeemspecifiek		
	ρ _{ANO}	Dichtheid anorganische stof	literatuur	2600.10 ³ g.m ⁻³		
	ρ _{ORG}	Dichtheid organische stof	literatuur	1000.10 ³ g.m ⁻³		
	V _{SN}	Sedimentatiesnelheid organische stof	experimenteel/ literatuur ^{1,4}	0.3 - 2.0 m.dag ⁻¹		
V _{SP}	Sedimentatiesnelheid algen		0.05-0.1 m.dag ⁻¹			
V _{SS}	Sedimentatiesnelheid zwevende stof		2-10 m.dag ⁻¹			

Type	Naam		Bron	Typische waarde
Externe variabelen	D	Dispersieconstante	zie Hoofdstuk 1	steeds specifiek
	F_{res}	Resuspensieflux	zie Hoofdstuk 4 & 5	steeds specifiek
	ME_{atm}	Diffuse bron	massabalans	steeds specifiek
	$PAOC$	Productiesnelheid AOC	zie Hoofdstuk 7 & 8	steeds specifiek

Bronnen: [1] Jörgensen and Gromiec (1989), [2] Jörgensen (1992), [3] Bowie et al. (1985), [4] Brown et al. (1987), [5] Portielje (1994).

11.3.2 Randvoorwaarden

Zowel op de randen van het te simuleren systeem, als voor alle lozingen op het systeem dienen voor de vijf toestandsvariabelen van de waterkolom randvoorwaarden opgegeven te worden. Op de systeemgrens gebeurt dit vaak door op basis van metingen een schatting te maken. Indien onvoldoende meetgegevens voorhanden zijn, moet de systeemgrens nauwkeurig gedefinieerd worden. Deze grens dient zodanig gekozen te worden, dat de randvoorwaarden de resultaten van de berekeningen op het punt waarin men is geïnteresseerd niet beïnvloeden.

Puntlozingen worden in DUFLOW ook beschouwd als randvoorwaarden. Voor alle toestandsvariabelen moet de kwaliteit van de lozing worden opgegeven. Dit betekent dat aan al het water dat het systeem inkomt een kwaliteit moet worden toegekend. In principe komt het er op neer, dat aan alle randvoorwaarden van het waterbewegingsmodel ook een kwaliteitsrandvoorwaarde moet worden toegekend.

Evenals voor de initiële condities kan het POC_w worden geschat uit het gloeiverlies van de zwevende stof. Het AOC_w gehalte berekent men uit het chlorofyl-a gehalte. Voor veel puntlozingen zal men echter kunnen aannemen, dat het chlorofylgehalte gelijk aan nul is.

Vanwege de balansvergelijkingen met totaal metaalconcentraties kan voor de zware metalen worden volstaan met het opgeven van het totaalgehalte in de lozingen en op de systeemgrenzen.

11.3.3 Parameters

Hier worden alleen de parameters besproken die specifiek zijn voor het model METAAL. Voor de parameters in de beschrijvingen voor de organische stofhuishouding wordt verwezen naar de handleidingen van EUTROF2A en OMIVE.

De dikte van de geoxideerde toplaag DZ1 is afhankelijk van de indringdiepte van zuurstof en nitraat. Onder deze laag bevindt zich een laag waar ijzer wordt gereduceerd. Dit is van belang, omdat zware metalen zich voornamelijk hechten aan Fe(III)-(hydr)oxyden; deze Fe(III)-(hydr)oxyden worden gevormd onder oxiderende condities. In de gereduceerde laag, waar ijzer aanwezig is als Fe(II), zijn de complexen beter oplosbaar, en bepaalt het oplosbaarheidsproduct van het betreffende metaalsulfide, onder voorwaarde dat er voldoende anorganisch zwavel aanwezig is, veelal de concentraties van het metaal in opgeloste vorm. De metaalsulfiden slaan neer in de poriën van de gereduceerde laag en vormen een onoplosbaar complex.

Tabel 11.4 geeft een overzicht van de maximaal oplosbare concentraties metaal in het poriewater bij een overmaat aan sulfide. Uit de tabel blijkt, dat voor Cu en Pb de precipitatie met sulfide een belangrijke rol speelt. De concentraties van deze metalen zijn immers zeer laag. Voor Arseen speelt de precipitatie met sulfide geen rol van bete-

kenis. In de gereduceerde laag wordt de adsorptie van As dan ook bepaald door complexvorming met DOC en adsorptie aan de vaste stof.

Tabel 11.4 Opgeloste concentratie metaal in het poriewater bij vorming van metaalsulfiden

Metaal	Constante concentratie opgelost metaal g.m ⁻³
Cu	0,003
Zn	0,01
Ni	0,025
Pb	0,003

De indringdiepte van zuurstof ligt veelal in de range van 0.5 - 2.0 cm, en hangt af van de effectieve diffusie-coëfficiënt en het verbruik van zuurstof in het poriewater door aërobe mineralisatie. Uiteraard is ook de zuurstofconcentratie in het bovenstaande water van belang.

Hoewel de geoxideerde toplaag dun is, en derhalve slechts een gering deel van de totale hoeveelheid van de zware metalen in de waterbodem representeert, is deze laag belangrijk voor de fluxen van opgelost metaal over het water-sediment grensvlak. De dikte van deze laag bepaalt namelijk de concentratiegradiënt aan het grensvlak (zie vergelijking 13).

De partiticoëfficiënten van metalen aan DOC zijn in het model berekend uit de stabiliteit van de complexen van het metaal met humus. Deze bedragen voor koper 7.5, voor nikkel 4.8, voor lood 5.6 en voor zink 4.7 (Buffle, 1990). Men heeft hierbij als uitgangspunt genomen, dat humus het belangrijkste bestanddeel van opgelost organisch koolstof is. De stabiliteitsconstante wordt gegeven door:

$$[33] \quad K_{0,3} = \frac{[MEHUM]}{[ME] \cdot [HUM]}$$

waarin: $K_{0,3}$ de evenwichtsconstante is (-)
 $[MEHUM]$ de concentratie van het metaal humus complex (= 1)
 $[ME]$ de concentratie opgelost metaal (g.m⁻³)
 $[HUM]$ de concentratie humus (g DOC.m⁻³)

Tabel 11.5 geeft de aldus berekende partiticoëfficiënten van metaal aan DOC. Bij de omrekening van equivalenten naar massa is aangenomen dat de massa van humus 1000 equivalenten per mol bedraagt en humus voor 50 % uit koolstof bestaat. Voor het watersysteemmodel Vecht (van Duin et al. 1994) bleek, dat de berekende waarde voor Cu te hoog was. Door kalibratie werd een waarde van 0.5 m³.g DOC⁻¹ vastgesteld.

Tabel 11.5 Partiticoëfficiënten voor DOC

Metaal	Partiticoëfficiënten m ³ .g DOC ⁻¹
As	10.10 ⁻⁶
Cu	24 (Vecht 0,5)
Zn	0,10
Ni	0,10
Pb	1,02

De partiticoëfficiënten aan vaste stof in de bodem worden in het model berekend met behulp van vergelijking 22 en 23. Deze kunnen eventueel gecorrigeerd worden voor pH en Chloride met behulp van vergelijking 23. Onderstaande tabel geeft een aantal typische waarden voor de constanten in deze vergelijkingen.

Tabel 11.6 Ongecorrigeerde partiticoëfficiënten op basis van adsorptie-equivalenten (KMESS') en de correctiefactoren voor pH (a) en saliniteit (b)

Variabele	KMESS' (l/eq.10 ⁻⁶)	a	b
As	0,003	0	0
Cu	0,085	1,25	-5,39.10 ⁻⁵
Ni	0,010	-	
Pb	0,231	1,176	-6,59.10 ⁻⁵
Zn	0,020	1,358	-8,06.10 ⁻⁵

De in de literatuur opgegeven partiticoëfficiënten aan zwevende stof in de waterkolom variëren sterk. In tabel 11.7 worden enkele waarden gegeven, zoals die in een aantal modellen worden toegepast. Het model ZWMET is ontwikkeld en toegepast voor een studie aan de Vecht. Er is uitgegaan van de waarden afkomstig van RIZA. De partiticoëfficiënten voor Cu, As en Zn zijn voor de Vecht door kalibratie vastgesteld.

Tabel 11.7 Aantal waarden voor de partiticoëfficiënten aan zwevend slib in de waterkolom (m³.g⁻¹)

variabele	HORIZON range	HORIZON mediaan	SOM3	DBW/RIZA	ZWMET
arseen	0.003-0.029	0.014	0.0002	0.01	0.1
koper	0.026-0.052	0.044	0.11	0.05	0.050
nikkel	0.003-0.016	0.008	-	0.008	0.008
lood	0.092-0.468	0.177	0.6	0.640	0.64
zink	0.027-0.13	0.042	0.1	0.11	0.22

Koelmans en Radovanovic (1996) hebben een model ontwikkeld, dat de overall partiticoëfficiënten in de waterkolom voor een aantal metalen (Cd, Cu, Pb, Ni en Zn) voorspelt op basis van een aantal afzonderlijke macro chemische milieuvariabelen (zoals bijvoorbeeld: chloride, pH, EGV en sulfaatgehalte) en karakteristieken van het zwevend slib (bijvoorbeeld: organisch koolstofgehalte, totaal Fe- en Mn- gehalte, CEC enz.). Naast het complexe model, dat gedetailleerde invoer van een groot aantal milieuvariabelen vraagt, presenteren Koelmans en Radovanovic ook een aantal simpele regressie vergelijkingen, waarmee een redelijke schatting van de partiticoëfficiënt kan worden verkregen.

11.3.4 Externe variabelen

De dispersieconstante dient als externe variabele ingevoerd te worden. Voor een overzicht van typische waarden hiervoor zie hoofdstuk 1.3.4. Voor het schatten en of berekenen van resuspensie fluxen wordt verwezen naar hoofdstuk 4 en 5. De productiesnelheid van algenbiomassa (AOC) wordt in het model niet beschreven en dient door de gebruiker te worden opgegeven. Deze kan eventueel met behulp van één van de

eutrofiëringsmodellen worden berekend en als functie van de tijd worden ingevoerd. Voor alle metalen geldt, dat in de balansvergelijking een gedistribueerde bron is meegenomen. Deze kan gebruikt worden om bijvoorbeeld de atmosferische depositie of andere diffuse bronnen in rekening te brengen.

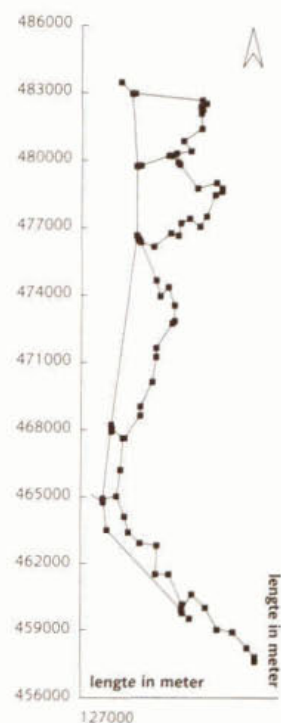
11.4 Voorbeeld Vecht

Dit voorbeeld is ontleend aan een modelstudie naar de Vecht. Doel is vooral te laten zien dat het model ook in complexe situaties kan worden gebruikt. Het systeem dat gesimuleerd wordt, is zowel complex wat betreft de waterhuishouding en waterbeweging als wat betreft de vele lozingen die er op plaatsvinden. Nadeel van een complex voorbeeld is, dat niet alle invoer in detail kan worden besproken en dat ook de resultaten niet zonder grondige studie van of voorkennis over het systeem kunnen worden geïnterpreteerd. Ten behoeve van dit illustratieve voorbeeld is de invoer dan ook vereenvoudigd. Zo wordt voor alle lozingen op het systeem gerekend met een constant debiet. Wel worden op de randen van het systeem in de tijd variërende debieten opgelegd. Ook voor de kwaliteit van deze lozingen is gewerkt met een tijdsvariërende concentratie. Overigens zijn dit gemiddelde concentraties.

11.4.1 Situatieschets

Figuur 11.3 geeft een schematisch overzicht van het watersysteemmodel Vecht. De Vecht stroomt van de stad Utrecht in noordelijke richting en staat in open verbinding met het Amsterdam-Rijnkanaal. In de zomermaanden wordt in het noorden vanuit het IJmeer water ingelaten. Als gevolg hiervan is gedurende deze periode in het noordelijk deel van de Vecht de stroomrichting van noord naar zuid. Terwijl in het zuidelijk deel, van Utrecht tot de sluis bij Nigtevecht het water naar het noorden stroomt. Ten gevolge van de spui bij laag water op het Noordzeekanaal ontstaat er op de boezem van het Amsterdam-Rijnkanaal een pseudo-getijdebeweging, die zich in de Vecht voortplant en tot in de stad Utrecht merkbaar is. Op het systeem lozen een groot aantal RWZI's en slaan een groot aantal polders water uit. Daarnaast wordt er in de zomermaanden water vanuit de Vecht in een aantal polders ingelaten.

Figuur 11.3 Watersysteemmodel Vecht



11.4.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

Er is een vrij gedetailleerde schematisering van de Vecht gemaakt. In principe zou voor het simuleren van metalen wel met een minder gedetailleerde schematisering kunnen worden volstaan. Detail is toch ingebracht, omdat het model ook gebruikt is voor het bestuderen van de waterbeweging in het systeem en tevens toegepast is voor het simuleren van modellen, waarin snellere processen een rol spelen.

Bij de indeling in secties en knopen is rekening gehouden met de ligging van lozingen, knooppunten van waterwegen en met veranderingen in het dwarsprofiel. Hierbij is gebruik gemaakt van gedetailleerde lodingskaarten van Rijkswaterstaat, waarop om de 50 m een dwarsprofiel wordt aangegeven. Indien in een traject het oppervlak van een profiel meer dan 10-20 % varieerde is een nieuwe sectie gedefinieerd. Alleen het Amsterdam-Rijnkanaal is in het model met minder detail geschematiseerd.

In de verbindingen tussen de Vecht en het Amsterdam-Rijnkanaal zijn fictieve waterwerken (structures) opgenomen. Dit biedt de mogelijkheid om het Amsterdam-Rijnkanaal te isoleren van de Vecht. Eén van de verbindingen wordt in de wintermaanden met een sluis afgesloten. Het tijdstip van deze afsluiting kan in DUFLOW worden gesimuleerd met een triggerfunctie.

INITIËLE CONDITIES

De initiële condities voor de waterbeweging zijn bepaald met de optie 'new initial conditions' (zie hoofdstuk 1, paragraaf 1.3.1). Hiervoor is een periode van een maand doorgerekend. Op deze wijze is een schatting verkregen van het initiële peilverloop en de waterverdeling in het systeem.

De keuze van de initiële condities in de waterkolom is in dit geval niet zo belangrijk. Het model rekent snel in. Na enkele dagen is het effect van de keuze van de initiële condities reeds verdwenen. Voor de waterbodem echter is de keuze van de initiële condities wel van belang, want deze kunnen door de traagheid van de processen in de waterbodem lang hun effect hebben op de simulatieuitkomsten. In het model is gebruik gemaakt van een gegevens afkomstig van een uitgebreid onderzoek naar de waterbodem kwaliteit. In het kader hiervan is op een groot aantal punten de samenstelling van het sediment bepaald. Vervolgens is getracht om per sectie uit de resultaten van dit onderzoek een zo goed mogelijke schatting van de begintoestand te verkrijgen.

RANDVOORWAARDEN

De randen van het watersysteemmodel Vecht worden gevormd door het begin van de Vecht bij de Rode Brug (de Weerdsuis, knoop 2), de sluis bij Muiden (het IJmeer, knoop 55), Het Amsterdam-Rijnkanaal bij Amsterdam (knoop 87) en het Amsterdam-Rijnkanaal bij Utrecht (knoop 70). Op knoop 2 en 87 is een debietrand opgelegd. Hierbij is gebruik gemaakt van meetgegevens afkomstig van daar geplaatste ADM's. Er is gerekend met daggemiddelde waarden. Op knoop 70 zijn gemeten waterpeilen als randvoorwaarde gebruikt. Aan de noordkant van het systeem zijn eveneens debieten opgelegd. Deze debieten zijn berekend uit geregistreerde peilen en schuifstanden, bij de sluis bij Muiden. Ook hier zijn daggemiddelde waarden gebruikt. De gegevens van de twee beschreven debietranden zijn voor het model in tijdseries opgenomen. Voor beide tijdseries geldt, dat slechts gegevens voor een periode van een jaar beschikbaar waren. Om toch vijf jaar te simuleren is vijf maal dezelfde dataset van een jaar als randvoorwaarde ingevoerd. Voor de lozingen van de RWZI's en industriële lozingen, waren gemeten daggemiddelde waarden beschikbaar. Het door de poldergemalen uitgeslagen water is berekend op basis van draaiuren en pompcapaciteiten. De hoeveelheid inlaatwater naar de polders toe is geschat op basis van een waterbalans. Hierin is gewerkt met jaargemiddelde waarden voor de debieten van alle lozingen.

Voor alle lozingen en systeemranden zijn voor de onderscheiden toestandsvariabelen concentraties als randvoorwaarden opgelegd. Waarden zijn afkomstig van een intensief meetprogramma. In het kader hiervan zijn een groot aantal

lozingen over een periode van een jaar bemonsterd. Voor de meeste lozingen geldt een bemonsteringsfrequentie van eens per maand. Voor een aantal niet bemeten polders is op basis van bekende gegevens eens schatting gemaakt. Als randvoorwaarden zijn jaargemiddelde waarden gebruikt. In de gevallen dat de kwaliteit van een belangrijke lozing een duidelijke seizoensinvloed toonde, zijn de concentraties van de betreffende lozing als functie van de tijd ingevoerd.

Het gemeten totaal organisch koolstofgehalte (TOC) is onderverdeeld in POC en AOC op basis van beschikbare gegevens over DOC en chlorofyl-a.

EXTERNE VARIABELEN

De waarde van de dispersie is voor het hele systeem constant verondersteld. Er is gebruikgemaakt van een waarde van $25 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Met deze waarde bleek het mogelijk de in het systeem optredende gradiënten van conservatieve stoffen redelijk te beschrijven (zie Hoofdstuk 1).

Er is voor alle metalen een diffuse belasting ingevoerd, die de atmosferische depositie representeert. De belastingen door de diffuse bronnen zijn uit de nota Watersysteem Model Vecht (1993) gehaald. De productie van AOC is geschat op basis van resultaten van simulaties met het model EUTROF2A.

PARAMETERS

Uitgangspunt bij de kalibratie van het model was het gebruik van waarden voor de parameters afkomstig uit de literatuur. Het model is voor de huidige situatie gekalibreerd aan de hand van meetgegevens in het systeem. Voor een gedetailleerde beschrijving van het model wordt verwezen naar Van Duin (1994). Met behulp van gegevens van het verloop van de concentratie aan zwevende stof, zijn de sedimentatiesnelheid en de resuspensieflux vastgesteld. Om de uitwisseling tussen sediment en water te bepalen zijn de dikte van de geoxideerde toplaag en de gereduceerde toplaag gevarieerd. Tevens is hierbij ook de effectieve diffusieconstante aan het grensvlak sediment-water gevarieerd. De volgende parameters leverden de beste resultaten:

$$DZ_1 = 0.01 \text{ m}$$

$$DZ_2 = 0.09 \text{ m}$$

$$E_{20} = 5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

Bij deze combinatie van parameters werd voor de meeste metalen een redelijke overeenstemming gevonden tussen de gesimuleerde en gemeten gehalten in de waterkolom. Een probleem, dat zich voordoet bij een dergelijke aanpak, is dat de parameters sterk uitwisselbaar kunnen zijn. Dat wil zeggen dat er verschillende combinaties te vinden zijn, die allemaal een vergelijkbaar resultaat opleveren. Uit een gevoeligheidsanalyse is echter gebleken dat de waarde van deze parameters er niet zoveel toe doet. Het model is het meest gevoelig voor de waarde van de partiticoëfficiënten. Voor een aantal metalen kon in dit geval worden volstaan met het gebruik van een literatuurwaarde, terwijl de partiticoëfficiënten voor arseen en die voor Cu aan DOC en Zn aan zwevende stof moesten worden aangepast om een goede overeenkomst tussen model en metingen te krijgen (zie ook 1.1.3.3).

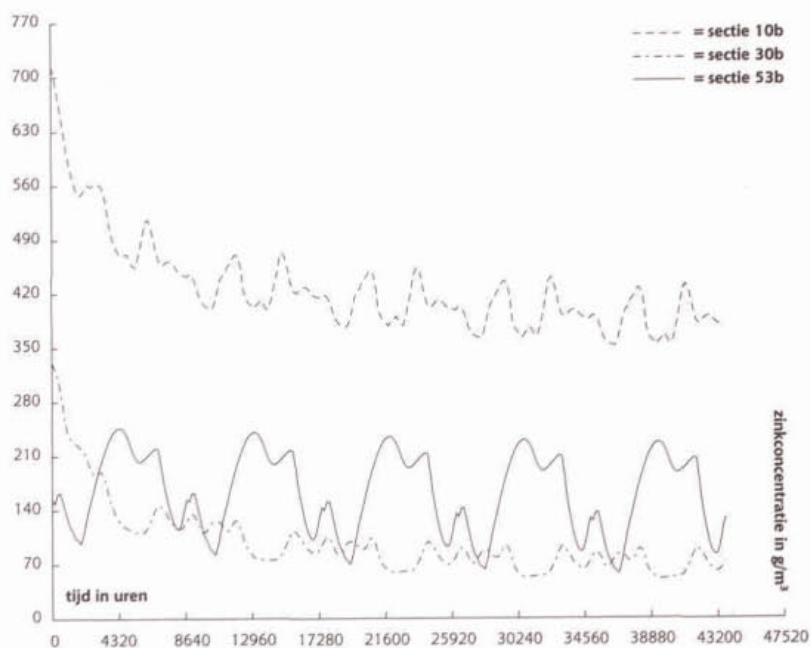
CALCULATION SETTINGS

Voor de waterbeweging is een tijdstap gebruikt van 2 uur. Deze is proefondervindelijk vastgesteld. Voor de kwaliteit kan met een tijdstap van 1 dag (24 uur) worden gerekend. Zeker indien lange periodes moeten worden doorgerekend verdient het aanbeveling na te gaan wat de grootst mogelijke tijdstap is. In dit geval is ook voor de kwaliteit de maximaal toegestane tijdstap proefondervindelijk vastgesteld. In dit geval wordt de maximaal toegestane tijdstap bepaald door de sedimentatiesnelheid van zwevende stof ($2.0 \text{ m} \cdot \text{dag}^{-1}$). Als uitvoerinterval is eens per week gekozen. De totale duur van de simulatie is 5 jaar. Daar het gaat om een simulatie over een lange periode is gedetailleerde uitvoer niet interessant. Bovendien wordt door de keuze van een groot uitvoerinterval de grootte van het uitvoerbestand beperkt. De grootte van dit bestand is in deze simulaties ook beperkt door slechts een beperkt aantal variabelen uit te voeren (te selecteren in Output variables in de calculation settings dialoog). Wel is uitvoer voor alle secties gevraagd, zodat het mogelijk is lengteprofielen van de concentratie op te vragen.

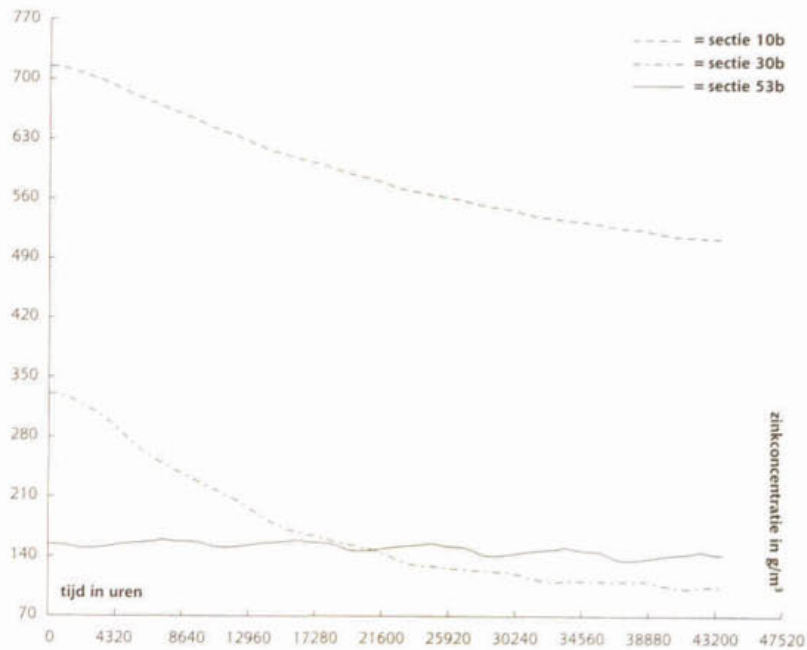
11.4.3 Resultaten

Figuren 11.4a en 11.4b tonen het verloop van de concentratie Zn in de waterbodem. Zowel de gehalten in de aërobe toplaag als in de gereduceerde tussenlaag worden weergegeven voor een drietal secties. Het getoonde verloop is het resultaat van een referentiescenario, waarbij het effect van reeds voorgenomen en ingezet beleid wordt gesimuleerd. Opvallend is dat in het zuidelijk deel van de Vecht (sectie 10) het gehalte in de aërobe toplaag snel afneemt. Na 5 jaar wordt een nieuwe stationaire toestand bereikt. De snelle afname kan worden verklaard uit de begraving van verontreinigd sediment door sedimentatie van gesuspendeerd materiaal met een betere kwaliteit. De afname in de gereduceerde tussenlaag is veel geleidelijker. In het verloop in de toplaag valt enige dynamiek waar te nemen, die het gevolg is van variaties in kwaliteit in de waterkolom. In de tussenlaag wordt het effect van variaties in de waterkwaliteit gedempt.

Figuur 11.4a Concentraties Zn in de aërobe sedimenttoplaag in sectie 10, 30 en 53

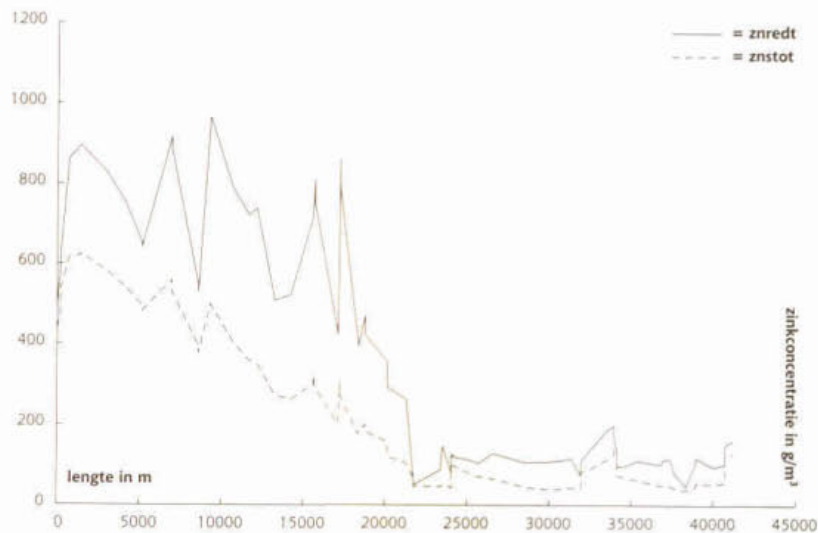


Figuur 11.4b Concentraties Zn in de gereduceerde tussenlaag in sectie 10, 30 en 53



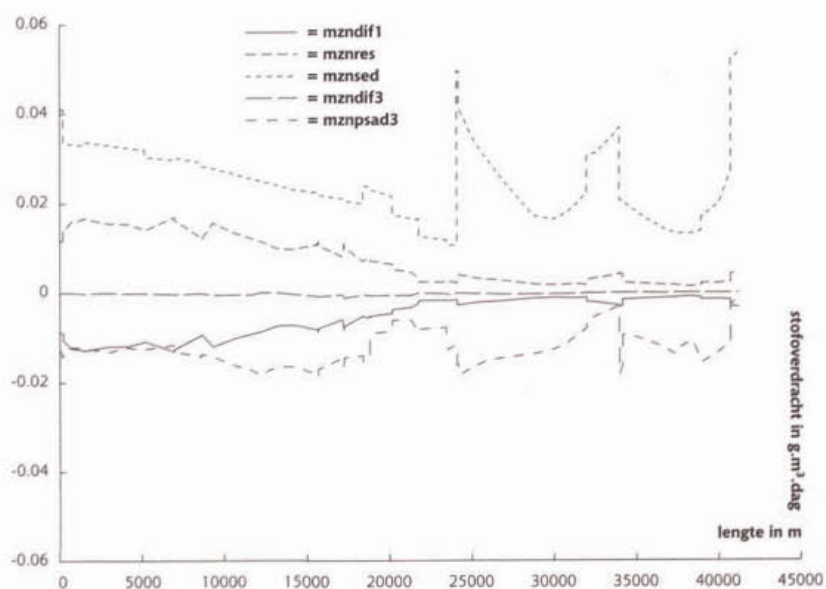
Figuur 11.5 toont het verloop van de concentratie in de beide sedimentlagen als functie van de afstand. Het gaat hier om de totaalgehalten, gebaseerd op het totaalvolume sediment. Het is uiteraard ook mogelijk om de verschillende fracties afzonderlijk of de gehalten uitgedrukt per g sediment uit te voeren (zie 11.2.8). De concentratie in beide sedimentlagen laten een duidelijke gradiënt zien. Door de grotere belasting in het zuidelijk deel van het systeem zijn de gehalten hier hoger en nemen naar het noorden af. De gehalten in de gereduceerde toplaag zijn enigszins hoger, hetgeen kan worden verklaard uit de vorming van metaalsulfides en de grotere verdunning met schoon gesuspendeerd materiaal in de dunne aërobe toplaag.

Figuur 11.5 Lengteprofiel voor Zn in aërobe toplaag en gereduceerde tussenlaag in de Vecht aan het einde van de simulatieperiode van 5 jaar



Figuur 11.6 geeft een overzicht van de fluxen over de grenzen van de totale toplaag. Alle individuele fluxen kunnen als functie worden opgevraagd (zie 11.2.7). Op deze wijze kan een massabalans over het sediment worden gemaakt. Weergegeven zijn de fluxen in de Vecht als functie van de afstand. Het diffusief transport tussen de gereduceerde tussenlaag en de inerte onderlaag is de kleinste term in de balans. Dit komt omdat de het verschil in concentratie tussen beide lagen slechts gering is en omdat de diffusie, die exponentieel afneemt met de diepte in het sediment, klein is op dit grensvlak. Zowel de sedimentatie als de resuspensieflux nemen geleidelijk af in noordelijke richting. De sedimentatieflux vertoont in het noordelijk deel van de Vecht een aantal pieken, die worden veroorzaakt door de lozing van de RWZI Horstermeer en de aanvoer van water met hoge Zn gehaltes vanuit de 's Gravenlandsevaart. De diffusieflux over het grensvlak water/sediment is in het noordelijk deel veel lager dan in het zuidelijk deel. Dit wordt verklaard uit de veel betere sediment kwaliteit in het noorden. Uit de grootte van de pseudo-advectief transport term tussen gereduceerde laag en onderlaag, blijkt dat in de hele Vecht netto sedimentatie plaatsvindt en een aanzienlijk deel van de verontreiniging wordt begraven.

Figuur 11.6 Fluxen over het grensvlak water/sediment en sediment/interte onderlaag aan het einde van de simulatieperiode van 5 jaar.



Literatuur

- Buffle, J., 1990, Humic and Fulvic Compounds, *Analytica Chimica Acta* 232, Elsevier, Amsterdam
- Bowie, G.L., et al, 1985, Rates, Constants and Kinetics. Formulations in Surface Water Quality Modelling, 2nd edition, EPA Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Athens, Georgia
- Brown, L.C., et al, 1987, The Enhanced Stream Water Quality Models Qual2E and Qual2E-UNCAS: Documentation and User Manual, EPA Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Athens, Georgia
- Duin, E.H.S. van, Portielje, R. En Aalderink, R.H., 1993, Watersysteem Model Vecht; Scenariostudies, Project Restauratie Plan Vecht, nota RPV 93.06b
- Duin, E.H.S. van, Portielje, R. En Aalderink, R.H., 1994, Watersysteem Model Vecht; modelontwikkeling en calibratie, Project Restauratie Plan Vecht, nota RPV 94.??
- Jørgensen, S.E. en Gromiec, M.J., 1989, Mathematical Submodels in Water Quality Systems, Developments in Environmental Modelling 14, Elsevier, Amsterdam
- Jørgensen, S.E., 1992., Modelling in Ecotoxicology, Developments in Environmental Modelling 16, Elsevier, Amsterdam
- Koelmans, A.A., en Radovanovic, H., 1996, Modelling Trace Metal Distribution in Surface Waters, Model Formulations and Calibration,
- Portielje, R., 1994, Response of Shallow Aquatic Ecosystems to Different Nutrient Loading Levels, dissertatie 1845 Landbouw Universiteit Wageningen, Wageningen
- Rathbun, R.E. and Tai, D.Y., 1981, Techniques for Determining the Volatilization Coefficients of Priority Pollutants in Streams, *Water Research* 15, 243-250.
- Schwarzenbach, R.P. Gschwend, P.M. and Imboden, D.M., 1993, Environmental Organic Chemistry, 681 pp., Wiley and Sons, New York.
- STOWA 1998, Duflow for Windows, Stowarapport 98-19.
- Ministerie van Volkshuisvesting, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer, 1993, Watersysteem Model Vecht Modelontwikkeling en Calibratie, nota RPV 93.06a, Landbouw Universiteit Wageningen

■ Bijlage 1

Procesbeschrijvingen zware metalen (METAL.MOD)

/*				*/
/*	MODEL METAL			*/
/*	Model voor zware metalen: arseen, koper, nikkel, lood, zink			*/
/*	STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW			*/
/*				*/
/*	Landbouwuniversiteit Wageningen			*/
/*	Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie			*/
/*	Postbus 8080			*/
/*	6700 DD Wageningen			*/
/*				*/
water	Aswtot	[0.005]	g/m3	; arseen totaal
water	Cuwtot	[0.005]	g/m3	; koper totaal
water	Niwtot	[0.005]	g/m3	; nikkel totaal
water	Pbwtot	[0.005]	g/m3	; lood totaal
water	POCw	[1.50]	g/m3	; POC in water
water	AOCw	[1.00]	g/m3	; algen koolstof
water	DOCw	[0.50]	g/m3	; opgelost organisch C waterkolom
water	SSw	[10.000]	g/m3	; zwevende stof water
water	Znwtot	[0.005]	g/m3	; zink totaal
bottom	Asredt	[1.000]	g/m3	; arseen totaal gereduceerde laag
bottom	AsStot	[1.000]	g/m3	; arseen totaal aerobe laag
bottom	Assubt	[1.000]	g/m3	; arseen totaal in onderlaag
bottom	Curedt	[1.000]	g/m3	; koper totaal gereduceerde laag
bottom	CuStot	[1.000]	g/m3	; koper totaal aerobe laag
bottom	Cusubt	[1.000]	g/m3	; koper totaal in onderlaag
bottom	Niredt	[1.000]	g/m3	; nikkel totaal gereduceerde laag
bottom	NiStot	[1.000]	g/m3	; nikkel totaal aerobe laag
bottom	Nisubt	[1.000]	g/m3	; nikkel totaal in onderlaag
bottom	Pbredt	[1.000]	g/m3	; lood totaal gereduceerde laag
bottom	PbStot	[1.000]	g/m3	; lood totaal aerobe laag
bottom	Pbsubt	[1.000]	g/m3	; lood totaal in onderlaag
bottom	DOCb	[70.0]	g/m3	; opgelost organisch C toplaat
bottom	DOCsub	[70.0]	g/m3	; opgelost organisch C sediment onderlaag
bottom	POCb	[25000]	g/m3	; POC concentratie, in sediment
bottom	POCsub	[25000]	g/m3	; opgelost POC in onderlaag
bottom	S	[4.000]	g/g	; totaal S
bottom	Znredt	[1.000]	g/m3	; zink totaal gereduceerde laag
bottom	ZnStot	[1.000]	g/m3	; zink totaal aerobe laag
bottom	Znsubt	[1.000]	g/m3	; zink totaal in onderlaag
parm	aAs	[0.0]	-	; correctiefactor pH
parm	aCu	[1.25]	-	; correctiefactor pH
parm	aNi	[0.0]	-	; correctiefactor pH
parm	aPb	[1.176]	-	; correctiefactor pH
parm	aZn	[1.358]	-	; correctiefactor pH
parm	bAs	[0.0]	-	; correctiefactor Cl
parm	bCu	[-0.0000539]	-	; correctiefactor Cl
parm	bNi	[0.0]	-	; correctiefactor Cl
parm	bPb	[-0.0000659]	-	; correctiefactor Cl
parm	bZn	[-0.0000806]	-	; correctiefactor Cl
parm	alfa	[0.5]	gPOC/gAOC	; conversie factor algen in POC
parm	Cusulf	[0.003]	g/m3	; constante concentratie, Cu-sulfide precipitatie
parm	DZ1	[0.010]	m	; dikte aerobe top laag
parm	DZ2	[0.09]	m	; dikte gereduceerde sublaag
parm	Ez0	[0.00005]	m2/dag	; effectieve diffusie coëff sediment/water
parm	FBX	[10.0]	-	; percentage sediment < 16µm
parm	FC	[0.52]	kg/kg	; organisch koolstof/algen ratio
parm	FWX	[30]	-	; percentage zwevend stof < 16 µm

parm	KAsDOC	[0.00001]	m3/g DOC	: partiticoeff. As op DOC
parm	KAsSS	[0.003]	1/eq*10-6	: partiticoeff. As op SS (equivalent)
parm	KAsSSw	[0.10]	m3/g SSw	: partiticoeff. As op SSw
parm	KCuDOC	[0.50]	m3/g DOC	: partiticoeff. Cu op DOC
parm	KCuSS	[0.085]	1/eq*10-6	: partiticoeff. Cu op SS (equivalent)
parm	KCuSSw	[0.050]	m3/g SSw	: partiticoeff. Cu op SSw
parm	KdAOC	[0.5]	1/dag	: snelheid afbraak phytoplankton
parm	KHYDw	[0.001]	1/dag	: snelheidsconstante hydrolyse POC water
parm	KHYDb	[0.00005]	1/dag	: snelheidsconstante hydrolyse POC sediment
parm	KdMINw	[0.040]	1/dag	: snelheidsconstante mineralisatie water
parm	KdMINb	[0.015]	1/dag	: snelheidsconstante mineralisatie sediment
parm	KNiDOC	[0.10]	m3/g DOC	: partiticoeff. Ni op DOC
parm	KNiSS	[0.010]	1/eq*10-6	: partiticoeff. Ni op SS (equivalent)
parm	KNiSSw	[0.008]	m3/g SSw	: partiticoeff. Ni op SSw
parm	KPbDOC	[1.02]	m3/g DOC	: partiticoeff. Pb op DOC
parm	KPbSS	[0.231]	1/eq*10-6	: partiticoeff. Pb op SS (equivalent)
parm	KPbSSw	[0.640]	m3/g SSw	: partiticoeff. As op SSw
parm	KZnDOC	[0.10]	m3/g DOC	: partiticoeff. Zn op DOC
parm	KZnSS	[0.020]	1/eq*10-6	: partiticoeff. Zn op SS (equivalent)
parm	KZnSSw	[0.220]	m3/g SSw	: partiticoeff. Zn op SSw
parm	Nisulf	[0.025]	g/m3	: constant concentratie. Ni-Sulfide precipitatie
parm	Pbsulf	[0.003]	g/m3	: constant concentratie. Pb-Sulfide precipitatie
parm	POR	[0.8]	-	: porositeit
parm	RHOANO	[2600000]	g/m3	: dichtheid organisch materiaal
parm	RHOORG	[1000000]	g/m3	: dichtheid anorganisch materiaal
parm	Vsp	[0.4]	m/dag	: sedimentatiesnelheid algen
parm	Vss	[1.5]	m/dag	: sedimentatiesnelheid SS
parm	Vsn	[0.7]	m/dag	: sedimentatiesnelheid organische stof
parm	Znsulf	[0.010]	g/m3	: constant concentratie. Zn-Sulfide precipitatie
xt	Asatm	[0.00]	g/m2/dag	: gedistribueerde bron As
xt	Cl	[200.0]	mg/l	: chloriniteit
xt	Cuatm	[0.00]	g/m2/dag	: gedistribueerde bron Cu
xt	Fres	[20.0]	g/m2/dag	: resuspensie flux
xt	Niatm	[0.00]	g/m2/dag	: gedistribueerde bron Ni
xt	PAOC	[1.0]	g/m2/dag	: AOC productiesnelheid
xt	Pbatm	[0.00]	g/m2/dag	: gedistribueerde bron Pb
xt	pHb	[6.0]	pH	: zuurgraad waterbodem
xt	Znatm	[0.00]	g/m2/dag	: gedistribueerde bron Zn
flow	Q	[4.00]	m3/s	: debiet
flow	V	[100000.]	m3	: helft sectievolume
flow	Z	[2.000]	m	: diepte

$$\{$$

$$SSb = RHOANO * ((1 - POR) - (POCb / (FC * RHOORG))) + (POCb / FC);$$

$$FCSSw = (POCw / FC) / SSw;$$

$$FCSSb = (POCb / FC) / SSb;$$

$$FOMw = FCSSw / RHOORG;$$

$$FSSw = (1 - FCSSw) / RHOANO;$$

$$FOMb = FCSSb / RHOORG;$$

$$FSSb = (1 - FCSSb) / RHOANO;$$

$$RHOSSw = RHOORG * (FOMw / (FOMw + FSSw)) + RHOANO * (FSSw / (FOMw + FSSw));$$

$$RHOSSb = RHOORG * (FOMb / (FOMb + FSSb)) + RHOANO * (FSSb / (FOMb + FSSb));$$

$$VR = Fres / (RHOSSb * (1 - POR));$$

$$VS = Vss * SSw / (RHOSSw * (1 - POR));$$

$$FSPOC = POCb / SSb;$$

$$Ez1 = 0.00001 + Ez0 * EXP(-DZ1 * 50);$$

$$Ez2 = 0.00001 + Ez0 * EXP(-(DZ1 + DZ2) * 50);$$

$KAsSSb = KAsSS * (0.0045 * FBX + 0.045 * (100 * FCSSb)^{0.7}) * EXP(aAs * pHb) * EXP(bAs * Cl);$
 $KCuSSb = KCuSS * (0.0045 * FBX + 0.045 * (100 * FCSSb)^{0.7}) * EXP(aCu * pHb) * EXP(bCu * Cl);$
 $KNiSSb = KNiSS * (0.0045 * FBX + 0.045 * (100 * FCSSb)^{0.7}) * EXP(aNi * pHb) * EXP(bNi * Cl);$
 $KPbSSb = KPbSS * (0.0045 * FBX + 0.045 * (100 * FCSSb)^{0.7}) * EXP(aPb * pHb) * EXP(bPb * Cl);$
 $KZnSSb = KZnSS * (0.0045 * FBX + 0.045 * (100 * FCSSb)^{0.7}) * EXP(aZn * pHb) * EXP(bZn * Cl);$

$AswDIS = Aswtot / (1 + KAsDOC * DOCw + KAsSSw * SSw);$
 $AswDOC = Aswtot * KAsDOC * DOCw / (1 + KAsDOC * DOCw + KAsSSw * SSw);$
 $AswSS = Aswtot * KAsSSw * SSw / (1 + KAsDOC * DOCw + KAsSSw * SSw);$
 $AsSDIS = AsStot / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * SSb);$
 $AsSDOC = AsStot * KAsDOC * DOCb / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * SSb);$
 $AsSSS = AsStot * KAsSSb * SSb / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * SSb);$
 $AsredDOC = Asredt * KAsDOC * DOCb / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * FCSSb * SSb);$
 $AsredSS = Asredt * KAsSSb * FCSSb * SSb / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * FCSSb * SSb);$
 $AsredDIS = Asredt / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * FCSSb * SSb);$
 $AssubDIS = Assubt / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * FCSSb * SSb);$
 $AssubDOC = Assubt * KAsDOC * DOCb / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * FCSSb * SSb);$
 $AssubSS = Assubt * KAsSSb * FCSSb * SSb / (1 + KAsDOC * DOCb + KAsSSb * FCSSb * SSb);$

$CuwDIS = Cuwtot / (1 + KCuDOC * DOCw + KCuSSw * SSw);$
 $CuwDOC = Cuwtot * KCuDOC * DOCw / (1 + KCuDOC * DOCw + KCuSSw * SSw);$
 $CuwSS = Cuwtot * KCuSSw * SSw / (1 + KCuDOC * DOCw + KCuSSw * SSw);$
 $CuSDIS = CuStot / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 $CuSDOC = CuStot * KCuDOC * DOCb / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 $CuSSS = CuStot * KCuSSb * SSb / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 if ($S <= 3.0$)
 {
 $CuredDOC = Curedt * KCuDOC * DOCb / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 $CuredSS = Curedt * KCuSSb * SSb / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 $CuredDIS = Curedt / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 }
 else
 {
 $CuredDIS = Cusulf;$
 $CuredDOC = KCuDOC * DOCb * CuredDIS;$
 $CuredSS = Curedt - (CuredDIS + CuredDOC);$
 }
 if ($S <= 3.0$)
 {
 $CusubDIS = Cusubt / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 $CusubDOC = Cusubt * KCuDOC * DOCb / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 $CusubSS = Cusubt * KCuSSb * SSb / (1 + KCuDOC * DOCb + KCuSSb * SSb);$
 }
 else
 {
 $CusubDIS = Cusulf;$
 $CusubDOC = KCuDOC * DOCb * CusubDIS;$
 $CusubSS = Cusubt - (CusubDIS + CusubDOC);$
 }

$NiwDIS = Niwtot / (1 + KNiDOC * DOCw + KNiSSw * SSw);$
 $NiwDOC = Niwtot * KNiDOC * DOCw / (1 + KNiDOC * DOCw + KNiSSw * SSw);$
 $NiwSS = Niwtot * KNiSSw * SSw / (1 + KNiDOC * DOCw + KNiSSw * SSw);$
 $NiSDIS = NiStot / (1 + KNiDOC * DOCb + KNiSSb * SSb);$
 $NiSDOC = NiStot * KNiDOC * DOCb / (1 + KNiDOC * DOCb + KNiSSb * SSb);$
 $NiSSS = NiStot * KNiSSb * SSb / (1 + KNiDOC * DOCb + KNiSSb * SSb);$
 if ($S <= 3.0$)
 {
 $NiredDOC = Niredt * KNiDOC * DOCb / (1 + KNiDOC * DOCb + KNiSSb * SSb);$
 $NiredSS = Niredt * KNiSSb * SSb / (1 + KNiDOC * DOCb + KNiSSb * SSb);$
 $NiredDIS = Niredt / (1 + KNiDOC * DOCb + KNiSSb * SSb);$
 }
 else
 {


```

NiredDIS = Nisulf;
NiredDOC = KNiDOC*DOCb*NiredDIS;
NiredSS = Niredt-(NiredDIS+NiredDOC);
}
if (S <= 3.0)
{
NisubDIS = Nisubt/(1 + KNiDOC*DOCb + KNiSSb*SSb);
NisubDOC = Nisubt*KNiDOC*DOCb/(1 + KNiDOC*DOCb + KNiSSb*SSb);
NisubSS = Nisubt*KNiSSb*SSb/(1 + KNiDOC*DOCb + KNiSSb*SSb);
}
else
{
NisubDIS = Nisulf;
NisubDOC = KNiDOC*DOCb*NisubDIS;
NisubSS = Nisubt-(NisubDIS+NisubDOC);
}
PbwDIS = Pbwtot/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSw*SSw);
PbwDOC = Pbwtot*KPbDOC*DOCb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSw*SSw);
PbwSS = Pbwtot*KPbSSw*SSw/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSw*SSw);
PbSDIS = PbStot/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
PbSDOC = PbStot*KPbDOC*DOCb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
PbSSS = PbStot*KPbSSb*SSb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
if (S <= 3.0)
{
PbredDOC = Pbredt*KPbDOC*DOCb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
PbredSS = Pbredt*KPbSSb*SSb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
PbredDIS = Pbredt/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
}
else
{
PbredDIS = Pbsulf;
PbredDOC = KPbDOC*DOCb*PbredDIS;
PbredSS = Pbredt-(PbredDIS+PbredDOC);
}
}
if (S <= 3.0)
{
PbsubDIS = Pbsubt/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
PbsubDOC = Pbsubt*KPbDOC*DOCb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
PbsubSS = Pbsubt*KPbSSb*SSb/(1 + KPbDOC*DOCb + KPbSSb*SSb);
}
else
{
PbsubDIS = Pbsulf;
PbsubDOC = KPbDOC*DOCb*PbsubDIS;
PbsubSS = Pbsubt-(PbsubDIS+PbsubDOC);
}
}
ZnwDIS = Znwtot/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSw*SSw);
ZnwDOC = Znwtot*KZnDOC*DOCb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSw*SSw);
ZnwSS = Znwtot*KZnSSw*SSw/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSw*SSw);
ZnSDIS = ZnStot/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
ZnSDOC = ZnStot*KZnDOC*DOCb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
ZnSSS = ZnStot*KZnSSb*SSb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
if (S <= 3.0)
{
ZnredDOC = Znredt*KZnDOC*DOCb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
ZnredSS = Znredt*KZnSSb*SSb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
ZnredDIS = Znredt/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
}
else
{
ZnredDIS = Znulf;
ZnredDOC = KZnDOC*DOCb*ZnredDIS;
ZnredSS = Znredt-(ZnredDIS+ZnredDOC);
}
}
if (S <= 3.0)

```



```

{
ZnsubDIS = Znsub/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
ZnsubDOC = Znsub*KZnDOC*DOCb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
ZnsubSS = Znsub*KZnSSb*SSb/(1 + KZnDOC*DOCb + KZnSSb*SSb);
}
else
{
ZnsubDIS = Znsub;
ZnsubDOC = KZnDOC*DOCb*ZnsubDIS;
ZnsubSS = Znsub-(ZnsubDIS + ZnsubDOC);
}
}

K1(AOCw) = -KdAOC-Vsp/Z;
K0(AOCw) = PAOC/Z;

K1(POCw) = -KHWDw-Vsn/Z;
K0(POCw) = KdAOC*alfa*AOCw + Fres*POCB/(SSb/Z);

K1(DOCw) = -KdMINw;
K0(DOCw) = KHWDw*POCw + (1-alfa)*KdAOC*AOCw
-EZ1*POR*(DOCw-DOCb/POR)/(0.5*(DZ1 + DZ2)*Z)
+ VR*DOCb/Z-VS*DOCw/Z;

K1(SSw) = -(Vss/Z);
K0(SSw) = Fres/Z + KdAOC*alfa*AOCw/FC-KHYDw*POCw/FC;

K1(POCB) = -KHYDb-Fres/(SSb*(DZ1 + DZ2))-VS/(DZ1 + DZ2);
K0(POCB) = Vsn*POCw/(DZ1 + DZ2) + Vsp*AOCw/(DZ1 + DZ2) + VR*POCsub/(DZ1 + DZ2);

K1(DOCb) = -KdMINb;
K0(DOCb) = KHYDb*POCB
+ EZ1*POR*(DOCw-DOCb/POR)/(0.5*(DZ1 + DZ2)*(DZ1 + DZ2))
-EZ2*(DOCb-DOCsub)/(0.5*(DZ1 + DZ2)*(DZ1 + DZ2))
-VR*DOCb/(DZ1 + DZ2) + VS*POR*DOCw/(DZ1 + DZ2)
+ VR*DOCsub/(DZ1 + DZ2)-VS*DOCb/(DZ1 + DZ2);

MAsatm = Asatm;
MAsSED = Vss*AswSS;
MAsRES = Fres*AsSS/SSb;
MAsDIF1 = + Ez0*POR*(AswDIS-AsSDIS/POR)/(0.5*DZ1)
+ Ez0*POR*(AswDOC-AsSDOC/POR)/(0.5*DZ1);
MAsDIF2 = + EZ1*(AsSDIS-AsredDIS)/(0.5*(DZ1 + DZ2))
+ EZ1*(AsSDOC-AsredDOC)/(0.5*(DZ1 + DZ2));
MAsDIF3 = + EZ2*(AsredDIS-AssubDIS)/(0.5*DZ2)
+ EZ2*(AsredDOC-AssubDOC)/(0.5*DZ2);
MAsPSAD1 = VR*(AsSDIS + AsSDOC)-VS*POR*(AswDIS + AswDOC);
MAsPSAD2 = VR*Asredt-VS*AsStot;
MAsPSAD3 = -VS*Asredt + VR*Assub;
K0(Aswtot) = (MAsRES-MAsSED-MAsDIF1 + MAsPSAD1 + MAsatm)/Z;
K0(AsStot) = (MAsSED-MAsRES + MAsDIF1-MAsDIF2-MAsPSAD1 + MAsPSAD2)/DZ1;
K0(Asredt) = (MAsDIF2-MAsDIF3-MAsPSAD2 + MAsPSAD3)/DZ2;

MCuatm = Cuatm;
MCuSED = Vss*CuwSS;
MCuRES = Fres*CuwSS/SSb;
MCuDIF1 = + Ez0*POR*(CuwDIS-CuSDIS/POR)/(0.5*DZ1)
+ Ez0*POR*(CuwDOC-CuSDOC/POR)/(0.5*DZ1);
MCuDIF2 = + EZ1*(CuSDIS-CuredDIS)/(0.5*(DZ1 + DZ2))
+ EZ1*(CuSDOC-CuredDOC)/(0.5*(DZ1 + DZ2));
MCuDIF3 = + EZ2*(CuredDIS-CusubDIS)/(0.5*DZ2)
+ EZ2*(CuredDOC-CusubDOC)/(0.5*DZ2);
MCuPSAD1 = VR*(CuSDIS + CuSDOC)-VS*POR*(CuwDIS + CuwDOC);
MCuPSAD2 = VR*Curedt-VS*Cusub;
MCuPSAD3 = -VS*Curedt + VR*Cusub;
K0(Cuwtot) = (MCuRES-MCuSED-MCuDIF1 + MCuPSAD1 + MCuatm)/Z;

```

$KO(CuStot) = (MCuSED - MCuRES + MCuDIF1 - MCuDIF2 - MCuPSAD1 + MCuPSAD2) / DZ1$;
 $KO(Curedt) = (MCuDIF2 - MCuDIF3 - MCuPSAD2 + MCuPSAD3) / DZ2$;

 $MNi_{atm} = Ni_{atm}$;
 $MNiSED = V_{ss} * Ni_{wSS}$;
 $MNiRES = Fres * Ni_{SSS} / SSb$;
 $MNiDIF1 = + Ez0 * POR * (Ni_{wDIS} - Ni_{SDIS} / POR) / (0.5 * DZ1)$
 $+ Ez0 * POR * (Ni_{wDOC} - Ni_{SDOC} / POR) / (0.5 * DZ1)$;
 $MNiDIF2 = + EZ1 * (Ni_{SDIS} - Ni_{redDIS}) / (0.5 * (DZ1 + DZ2))$
 $+ EZ1 * (Ni_{SDOC} - Ni_{redDOC}) / (0.5 * (DZ1 + DZ2))$;
 $MNiDIF3 = + EZ2 * (Ni_{redDIS} - Ni_{subDIS}) / (0.5 * DZ2)$
 $+ EZ2 * (Ni_{redDOC} - Ni_{subDOC}) / (0.5 * DZ2)$;
 $MNiPSAD1 = VR * (Ni_{SDIS} + Ni_{SDOC}) - VS * POR * (Ni_{wDIS} + Ni_{wDOC})$;
 $MNiPSAD2 = VR * Ni_{redt} - VS * Ni_{Stot}$;
 $MNiPSAD3 = -VS * Ni_{redt} + VR * Ni_{subt}$;
 $KO(Ni_{wtot}) = (MNiRES - MNiSED - MNiDIF1 + MNiPSAD1 + MNi_{atm}) / Z$;
 $KO(Ni_{Stot}) = (MNiSED - MNiRES + MNiDIF1 - MNiDIF2 - MNiPSAD1 + MNiPSAD2) / DZ1$;
 $KO(Ni_{redt}) = (MniDIF2 - MNiDIF3 - MNiPSAD2 + MNiPSAD3) / DZ2$;

 $MPb_{atm} = Pb_{atm}$;
 $MPbSED = V_{ss} * Pb_{wSS}$;
 $MPbRES = Fres * Pb_{SSS} / SSb$;
 $MPbDIF1 = + Ez0 * POR * (Pb_{wDIS} - Pb_{SDIS} / POR) / (0.5 * DZ1)$
 $+ Ez0 * POR * (Pb_{wDOC} - Pb_{SDOC} / POR) / (0.5 * DZ1)$;
 $MPbDIF2 = + EZ1 * (Pb_{SDIS} - Pb_{redDIS}) / (0.5 * (DZ1 + DZ2))$
 $+ EZ1 * (Pb_{SDOC} - Pb_{redDOC}) / (0.5 * (DZ1 + DZ2))$;
 $MPbDIF3 = + EZ2 * (Pb_{redDIS} - Pb_{subDIS}) / (0.5 * DZ2)$
 $+ EZ2 * (Pb_{redDOC} - Pb_{subDOC}) / (0.5 * DZ2)$;
 $MPbPSAD1 = VR * (Pb_{SDIS} + Pb_{SDOC}) - VS * POR * (Pb_{wDIS} + Pb_{wDOC})$;
 $MPbPSAD2 = VR * Pb_{redt} - VS * Pb_{Stot}$;
 $MPbPSAD3 = -VS * Pb_{redt} + VR * Pb_{subt}$;
 $KO(Pb_{wtot}) = (MPbRES - MPbSED - MPbDIF1 + MPbPSAD1 + MPb_{atm}) / Z$;
 $KO(Pb_{Stot}) = (MPbSED - MPbRES + MPbDIF1 - MPbDIF2 - MPbPSAD1 + MPbPSAD2) / DZ1$;
 $KO(Pb_{redt}) = (MPbDIF2 - MPbDIF3 - MPbPSAD2 + MPbPSAD3) / DZ2$;

 $MZn_{atm} = Zn_{atm}$;
 $MZnSED = V_{ss} * Zn_{wSS}$;
 $MZnRES = Fres * Zn_{SSS} / SSb$;
 $MZnDIF1 = + Ez0 * POR * (Zn_{wDIS} - Zn_{SDIS} / POR) / (0.5 * DZ1)$
 $+ Ez0 * POR * (Zn_{wDOC} - Zn_{SDOC} / POR) / (0.5 * DZ1)$;
 $MZnDIF2 = + EZ1 * (Zn_{SDIS} - Zn_{redDIS}) / (0.5 * (DZ1 + DZ2))$
 $+ EZ1 * (Zn_{SDOC} - Zn_{redDOC}) / (0.5 * (DZ1 + DZ2))$;
 $MZnDIF3 = + EZ2 * (Zn_{redDIS} - Zn_{subDIS}) / (0.5 * DZ2)$
 $+ EZ2 * (Zn_{redDOC} - Zn_{subDOC}) / (0.5 * DZ2)$;
 $MZnPSAD1 = VR * (Zn_{SDIS} + Zn_{SDOC}) - VS * POR * (Zn_{wDIS} + Zn_{wDOC})$;
 $MZnPSAD2 = VR * Zn_{redt} - VS * Zn_{Stot}$;
 $MZnPSAD3 = -VS * Zn_{redt} + VR * Zn_{subt}$;
 $KO(Zn_{wtot}) = (MZnRES - MZnSED - MZnDIF1 + MZnPSAD1 + MZn_{atm}) / Z$;
 $KO(Zn_{Stot}) = (MZnSED - MZnRES + MZnDIF1 - MZnDIF2 - MZnPSAD1 + MZnPSAD2) / DZ1$;
 $KO(Zn_{redt}) = (MZnDIF2 - MZnDIF3 - MZnPSAD2 + MZnPSAD3) / DZ2$;

 $AsDISw = AswDIS + AswDOC$;
 $AsDISS = (AsSDIS + AsSDOC) / POR$;
 $AsDISred = (AsredDIS + AsredDOC) / POR$;
 $AsSSw = 1000 * AswSS / SSw$;
 $AsSSS = 1000 * AsSSS / SSb$;
 $AsSSred = 1000 * AsredSS / SSb$;

 $CuDISw = CuwDIS + CuwDOC$;
 $CuDISS = (CuSDIS + CuSDOC) / POR$;
 $CuDISred = (CuredIS + CuredDOC) / POR$;
 $CuSSw = 1000 * CuwSS / SSw$;
 $CuSSS = 1000 * CuSSS / SSb$;
 $CuSSred = 1000 * CuredSS / SSb$;

$NiDISw = NiwDIS + NiwDOC;$
 $NiDISS = (NiSDIS + NiSDOC)/POR;$
 $NiDISred = (NiredDIS + NiredDOC)/POR;$
 $NiSSw = 1000 * NiwSS/SSw;$
 $NiSSS = 1000 * NiSSS/SSb;$
 $NiSSred = 1000 * NiredSS/SSb;$

$PbDISw = PbwdIS + PbwdOC;$
 $PbDISS = (PbSDIS + PbSDOC)/POR;$
 $PbDISred = (PbredDIS + PbredDOC)/POR;$
 $PbSSw = 1000 * PbWSS/SSw;$
 $PbSSS = 1000 * PbSSS/SSb;$
 $PbSSred = 1000 * PbredSS/SSb;$

$ZnDISw = ZnwdIS + ZnwdOC;$
 $ZnDISS = (ZnSDIS + ZnSDOC)/POR;$
 $ZnDISred = (ZnredDIS + ZnredDOC)/POR;$
 $ZnSSw = 1000 * ZnWSS/SSw;$
 $ZnSSS = 1000 * ZnSSS/SSb;$
 $ZnSSred = 1000 * ZnredSS/SSb;$
}

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

Watertemperatuur

december 1996

hoofdstuk

12

R.H. Aalderink

*Landbouwniversiteit Wageningen
Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer
en Aquatische Oecologie*

hoofdstuk

12

Inhoudsopgave

12.1 Watertemperatuur 5

- 12.1.1 Toepassingmogelijkheden en beperkingen 5
- 12.1.2 Volledige warmtebalans (TEMP) 6
- 12.1.3 Vereenvoudigde warmtebalans (TREV) 9
 - 12.1.3.1 Benadering volgens Edinger 9
 - 12.1.3.2 Surplus temperatuur 12

12.2 Procesbeschrijvingen 12

- 12.2.1 Model TEMP volledige warmtebalans 12
- 12.2.2 Vereenvoudigde benadering volgens Edinger 13
 - 12.2.2.1 Toepassing voor stationaire situaties 13
 - 12.2.2.2 Toepassing voor dynamische situaties model TREV 14

12.3 Benodigde invoer 14

- 12.3.1 Model TEMP gebaseerd op volledige warmtebalans 14
- 12.3.2 Model TREV gebaseerd op benadering volgens Edinger 15

12.4 Voorbeeld 16

- 12.4.1 Situatieschets 16
- 12.4.2 DufLOW invoer 17
- 12.4.3 Resultaten 17

Literatuur 20

Bijlagen

- Bijlage 1a* *Procesbeschrijvingen model TEMP* 21
- Bijlage 1b* *Procesbeschrijvingen model TREV* 22
- Bijlage 2* *Beschrijving van het programma TEQUIL* 23

12.1 Watertemperatuur

Er zijn verschillende modellen waarmee de watertemperatuur kan worden beschreven. Afhankelijk van het doel, de aard van het systeem en de beschikbaarheid van invoergegevens kunnen meer of minder gedetailleerde modellen worden toegepast. In dit hoofdstuk worden een tweetal modellen besproken. Het eerste model TEMP gaat uit van een volledige beschrijving van alle termen in de warmtebalans. In dit model wordt de watertemperatuur als functie van tijd en plaats beschreven. De meteorologische condities kunnen als invoer voor het model worden gebruikt. Het tweede model TREV is eenvoudiger en maakt gebruik van een zogenaamde evenwichtstemperatuur en een warmteoverdrachtsconstante.

12.1.1 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen

Beide benaderingen kunnen worden toegepast om het effect van thermische lozingen, bijvoorbeeld van een electriciteitscentrale, te voorspellen. De modellen kunnen worden toegepast in het kader van vergunningverlening om na te gaan in hoeverre de norm voor de temperatuur van het ontvangende water wordt overschreden. Daarnaast geldt dat veel processen in oppervlaktewater afhankelijk zijn van de temperatuur. Dit geldt zowel voor biologische processen als afbraak en groei, maar ook voor fysische processen als diffusie en stofoverdracht. Beide modellen worden gebruikt om variaties in watertemperatuur te simuleren, die kunnen vervolgens dienen als invoer voor andere modellen.

Het model TEMP, gebaseerd op een volledige warmtebalans, vraagt een grote hoeveelheid aan invoer met betrekking tot de meteorologische condities en zal dan ook in veel gevallen slechts gebruikt worden voor reconstructie van een historisch temperatuurverloop, waarbij gemeten invoer wordt gebruikt en de modelresultaten worden vergeleken met het gemeten temperatuurverloop in het watersysteem. Als invoer worden in dat geval weergegevens gebruikt van een typisch jaar.

Als het simuleren van de watertemperatuur doel op zich is, bijvoorbeeld om invoer te genereren voor een ander model, kan men zich afvragen of het niet zinvoller en eenvoudiger is om de watertemperatuur direct te meten en dat als invoer te gebruiken. Wel kan het model uiteraard gebruikt worden om het effect van veranderingen in of van het watersysteem te voorspellen. Zo kan men met het model het effect van bijvoorbeeld een debietsverhoging of een warmtelozing onderzoeken. Ook kan het dynamische model worden gebruikt om de meest kritische periode te zoeken.

Het model TREV, waarbij gebruik gemaakt van een zogenaamde evenwichtstemperatuur en een totale warmteoverdrachtsconstante vraagt veel minder invoer, als het dynamische model TEMP. Probleem is echter dat de evenwichtstemperatuur en de warmteoverdrachtsconstante, in dit geval in DUFLOW als externe variabelen gedefinieerd, afhangen van de meteorologische condities. Hetgeen betekent dat ook voor dit model historische weergegevens nodig zijn om beide parameters te kunnen berekenen. Echter uitgaande van gemiddelde meteorologische condities, kunnen richtwaarden voor de parameters worden gegeven. Met behulp hiervan kan het model eenvoudig worden toegepast en geeft het voor een eerste beoordeling van het effect van een warmtelozing een redelijke schatting. Veelal wordt deze eenvoudige benadering toegepast voor stationaire condities. Dat wil zeggen dat als de waterbeweging stationair

is, de warmte lozingen en ook de meteorologische condities constant zijn. In paragraaf 12.2.2 worden voor zowel een ideaal gemengd als een stromend systeem vergelijkingen gegeven waarmee eenvoudig het effect van een lozing kan worden berekend.

Zowel het model TEMP als het model TREV gaan uit van volledige menging over de dwarsdoorsnede. Dit betekent, dat de genoemde modellen niet toepasbaar zijn voor gestratificeerde systemen. In veel diepe systemen, kunnen door opwarming aan het oppervlak en slechte verticale menging, sterke temperatuurgradiënten en daarmee samenhangende gradiënten in dichtheid ontstaan. Eventueel kan door onderscheid te maken in een top- en onderlaag het verloop van de temperatuur in dergelijke systemen wel op eenvoudige wijze worden gesimuleerd. Dit vergt overigens wel enige aanpassing van het model. Met de in dit hoofdstuk gepresenteerde modellen is simulatie van dergelijke systemen niet mogelijk.

Ook in systemen waarin slechte menging in de breedte richting optreedt kunnen gezien het één-dimensionale karakter van DUFLOW de beide thermische modellen niet zonder meer worden toegepast. Voor dergelijke systemen moeten tweedimensionale modellen worden toegepast. Overigens moet worden opgemerkt, dat in de richtlijnen voor koelwaterlozingen uitgegaan wordt van een maximaal toelaatbare temperatuurverhoging over het dwarsprofiel van het systeem. Hetgeen betekent dat de met de modellen berekende temperatuur aan sluit bij deze richtlijnen. Het werkelijk verloop van de temperatuur kan door het optreden van slechte menging over grote afstand benedenstrooms de lozing leiden tot aanzienlijke verschillen in temperatuur over zowel de breedte als de diepte.

12.1.2 Volledige warmtebalans (TEMP)

Bij deze benadering wordt de temperatuur als functie van tijd en plaats gesimuleerd en worden de diverse warmtefluxen over het grensvlak water-lucht dynamisch beschreven. Voor een eendimensionaal systeem wordt de warmte-transportvergelijking gegeven door:

$$[1] \quad \frac{\partial(\rho \cdot C_p \cdot T)}{\partial t} = -u_x \cdot \frac{\partial(\rho \cdot C_p \cdot T)}{\partial x} + \left(E_x \cdot \frac{\partial^2(\rho \cdot C_p \cdot T)}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{Z} \sum F$$

Waarin de eerste twee termen van het rechterlid respectievelijk de advectie en dispersie beschrijven en de laatste term de som van de uitwisselingsfluxen weergeeft. ρ is de dichtheid van water in $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ en C_p is de soortelijke warmte van water, gelijk aan $4,2 \cdot 10^3 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$. E_x en u_x zijn respectievelijk de dispersie ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) en de stroomsnelheid ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$) in de stromingsrichting. Z is de waterdiepte in m. Advectie en dispersie worden in DUFLOW standaard berekend en worden niet in dit hoofdstuk besproken (zie paragraaf 1.2; EDS, 1995).

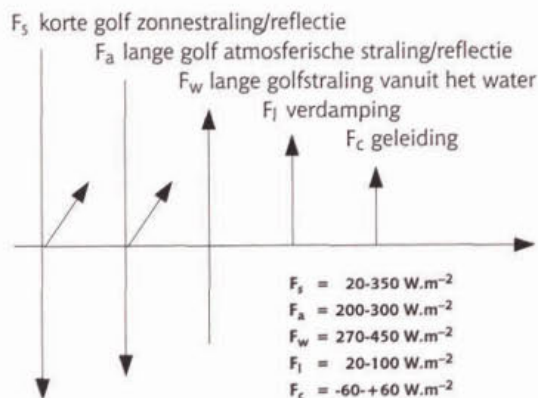
Hieronder zal een korte omschrijving worden gegeven van de warmtefluxen over het grensvlak water-lucht. Figuur 12.1 geeft aan welke fluxen van belang zijn. Uit de orde van grootte blijkt, dat geen van de fluxen verwaarloosd mag worden. In de meeste thermische modellen worden dan ook alle fluxen beschreven.

KORTE GOLFSTRALING

De korte golfstraling F_s is de straling in het gebied met een golflengte kleiner dan $4 \mu\text{m}$, waarin het zichtbaar licht 400-800 nm een belangrijk aandeel heeft in de totale stralingsenergie. De stralingsenergie aan de rand van de atmosfeer is constant en

bedraagt 1352 W.m^{-2} . Door verstrooiing en absorptie in de atmosfeer bereikt slechts een deel van de straling het aardoppervlak.

Figuur 12.1 Warmtefluxen over het grensvlak water-lucht. Orde van grootte van de fluxen voor typisch Nederlandse condities.



Verstrooiing en absorptie, hangen o.a. samen met de weglengte in de atmosfeer en met de bewolgingsgraad. In de literatuur zijn allerlei complexe relaties te vinden, waarmee de korte golfstraling kan worden beschreven als functie van het seizoen en het tijdstip op de dag en de breedtegraad. In het Cultuurtechnisch Vademecum (Cultuurtechnische Vereniging, 1988) worden de dagsommen van de inkomende straling aan de rand van de atmosfeer getabelleerd voor een aantal breedtegraden. In het algemeen is het echter handiger om gebruik te maken van gemeten waarden. Zo bepaalt het KNMI dagelijks de dagsom van de globale straling, terwijl op sommige stations zelfs uursommen van de globale straling worden gemeten. Eventueel kunnen de dagsommen met behulp van een periodieke functie worden omgezet in een verloop van de straling over de dag.

Een deel van de korte golfstraling wordt gereflecteerd. De gereflecteerde fractie hangt af van de stand van de zon. In modellen wordt meestal gewerkt met een gemiddelde waarde voor de reflectie van 10% van de totale instraling over een dag. Door golfvorming onder invloed van de wind neemt de reflectie af. In het Cultuurtechnisch Vademecum (Cultuurtechnische Vereniging, 1988) wordt voor Nederlandse condities een gemiddelde waarde van 6 % voorgesteld.

LANGE GOLFSTRALING VANUIT DE ATMOSFEER

Dit is de warmtestraling, waarvan het grootste deel ligt in het golflengte gebied tussen 8 en 14 μm . Volgens de wet van Stefan-Boltzmann geldt, dat de straling, die wordt uitgezonden door een lichaam, recht evenredig is met de temperatuur tot de macht 4. Voor de warmtestraling vanuit de atmosfeer wordt wel gebruikt:

$$[2] \quad F_a = \epsilon_a \cdot \sigma \cdot T_a^4$$

waarin:

- σ de constante van Stefan en Boltzmann $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ (W.m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4})$
- ϵ_a de emissiviteit, deze factor geeft aan in hoeverre de atmosfeer zich als een zwart lichaam gedraagt (-)
- T_a de temperatuur van de lucht ($^{\circ}\text{K}$)

De emissiviteit wordt bepaald door factoren zoals de luchtvochtigheid. Een veel gebruikte empirische relatie wordt gegeven door:

$$[3] \quad \epsilon_a = (0.53 + 0.067 \sqrt{e_a}) \cdot (1 + 0.17b^2)$$

waarin: e_a de dampspanning van water (mBar)
 b een maat voor de bewolgingsgraad ($0 < b < 1$)

Het blijkt dat al een redelijke schatting van de warmte flux wordt gekregen wanneer voor T_a de luchttemperatuur op een hoogte van enkele meters wordt genomen. Ook een deel van de lange golfstraling wordt gereflecteerd. Een veel gebruikte waarde voor de reflectie is 3 %.

DE LANGE GOLFSTRALING VANUIT HET WATER

Ook het water zendt lange golfstraling uit. De warmte flux wordt gegeven door:

$$[4] \quad F_w = 0.97 \cdot \sigma \cdot T_w^4$$

waarin: T_w de watertemperatuur ($^{\circ}\text{K}$)

De factor 0,97 is gelijk aan de emissiviteit van water.

VERDAMPING

Het verdampen van water kost energie, dat wordt onttrokken aan het water. Hierdoor daalt de temperatuur. Het warmtetransport door verdamping wordt bepaald door de dampspanningsgradiënt en de turbulentie aan het grensvlak. Voor de flux geldt:

$$[5] \quad F_L = K \cdot (e_0 - e_a)$$

waarin: e_0 de luchtvochtigheid aan het grensvlak (mBar)
 e_a de luchtvochtigheid op enige meters boven het wateroppervlak (mBar)
 K een constante ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{mBar}^{-1}$)

De constante K wordt bepaald door de verdampingssnelheid en de hoeveelheid energie, die nodig is om water te verdampen. In de literatuur zijn een groot aantal relaties bekend die de verdampingssnelheid relateren aan de windsnelheid. De meeste van deze empirische relaties veronderstellen een lineair verband met de windsnelheid. Een veel gebruikte vergelijking is die volgens Sweers (1976):

$$[6] \quad K = 4.4 + 1.82 \cdot W_{10}$$

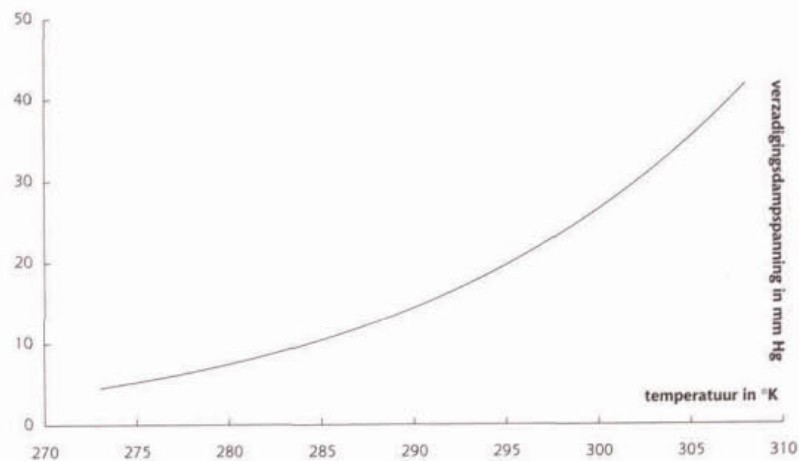
Waarin W_{10} de windsnelheid is op een hoogte van 10 m.

Voor de luchtvochtigheid aan het grensvlak (e_0) wordt veelal de verzadigingsdampspanning van water (e_s) gebruikt. Men neemt dan aan dat de lucht aan het grensvlak verzadigd is met waterdamp. De spanning van de verzadigde waterdamp hangt af van de temperatuur. Met de volgende empirische vergelijking beschrijft men deze afhankelijkheid:

$$[7] \quad e_s(T) = 0,75 \cdot \exp[54,721 - 6788,6 \cdot T^{-1} - 5,0016 \cdot \ln(T)]$$

In deze vergelijking is T uitgedrukt in °K en e_s in mm Hg. In figuur 12.2 is deze relatie grafisch uitgezet. Om de dampspanning uit te drukken in mBar, is vergelijking 7 vermenigvuldigd met een factor 1,33.

Figuur 12.2 Afhankelijkheid van de verzadigingsdampspanning als functie van de temperatuur in °K.



GELEIDING

Evenals het warmte transport door verdamping wordt de geleiding van warmte over het grensvlak water-lucht bepaald door de turbulentie aan het grensvlak. De drijvende kracht is in dit geval de temperatuurgradiënt. Volgens Bowen is de verhouding van de warmte fluxen door geleiding en verdamping gelijk aan de verhouding tussen de temperatuur- en de dampspanningsgradiënt. Er geldt (Brown, 1985):

$$[8] \quad \frac{F_c}{F_L} = 0,619 \cdot 10^{-3} \cdot P \cdot \frac{T_w - T_a}{e_s - e_a}$$

Waarin P, de heersende luchtdruk, in mBar is uitgedrukt.

12.1.3 Vereenvoudigde warmtebalans

Naast de thermische modellen die gebaseerd zijn op de volledige beschrijving van alle warmtefluxen over het grensvlak water-lucht, worden ook eenvoudiger beschrijvingswijzen toegepast. Deze benaderingen zijn gebaseerd op de zogenaamde evenwichtstemperatuur. Deze benaderingen bieden de mogelijkheid om op eenvoudige wijze een eerste indruk van het effect van een warmtelozing te krijgen.

12.1.3.1 BENADERING VOLGENS EDINGER

De eerste benadering, die hier wordt beschreven, is de onder meer door de EPA veelvuldig gebruikte benadering volgens Edinger (1965). In dit concept wordt gebruik gemaakt van een zogenaamde evenwichtstemperatuur en een warmteoverdrachtscoëfficiënt voor het grensvlak water-lucht. De totale warmteflux over het grensvlak wordt door Edinger beschreven als:

$$[9] \quad \sum F = K \cdot (T_e - T)$$

waarin: K een warmte-overdrachtscoëfficiënt ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$)
 T_e de zogenaamde evenwichtstemperatuur ($^\circ\text{C}$)

De evenwichtstemperatuur is gedefinieerd als de temperatuur die zou worden bereikt als alle meteorologische condities constant zouden zijn. In dat geval is het water in evenwicht met de omgevingscondities en geldt dat de netto uitwisselingsflux ($\sum F$) gelijk is aan nul. Op grond hiervan kan met gemiddelde meteorologische condities (dag- of weekgemiddelde) een schatting van de evenwichtstemperatuur worden verkregen. Gezien de complexe afhankelijkheid tussen een aantal uitwisselingsfluxen en de watertemperatuur leidt de conditie $\sum F = 0$ tot een ingewikkelde vergelijking die met behulp van iteratie of een nulpuntszoekroutine kan worden opgelost.

Edinger geeft dan ook een eenvoudiger benadering waarbij de evenwichtstemperatuur wordt gegeven door:

$$[10] \quad T_e = T_d + \frac{F_s}{K}$$

waarin: T_d de dauwpuntstemperatuur ($^\circ\text{C}$)
 F_s de korte golfstraling vanuit de atmosfeer ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$)

De warmte-overdrachtscoëfficiënt (K) is een lumped parameter, die bepaald wordt door de dampspanning- en temperatuurgradiënt en de turbulentie aan het grensvlak, hiermee hangt K dus af van de windsnelheid.

Edinger geeft de volgende empirische relatie:

$$[11] \quad K = 4,5 + 0,05 \cdot T_w + \beta \cdot f(W) + 0,47 \cdot f(W)$$

waarin: $f(W)$ een functie, die de afhankelijkheid van de windsnelheid beschrijft.
 β een functie, die de afhankelijkheid van de temperatuur beschrijft.

Er geldt:

$$[12] \quad f(W) = 9,2 + 0,46 \cdot W^2 \quad \text{en:}$$

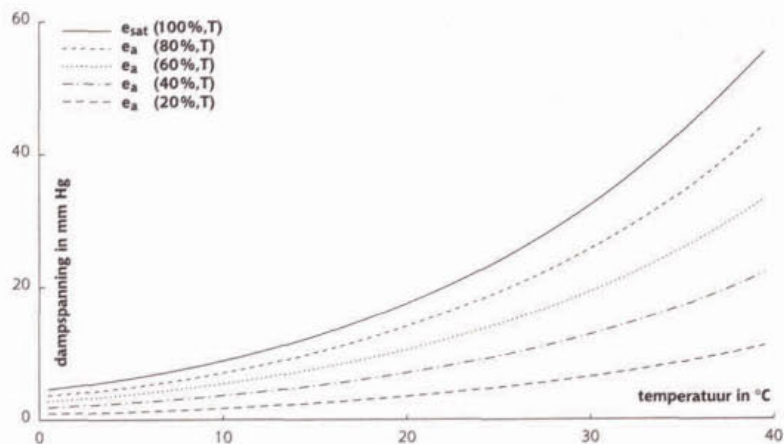
$$[13] \quad \beta = 0,35 + 0,015 \cdot T_m + 0,0012 \cdot T_m^2$$

T_m is gelijk aan het gemiddelde van de watertemperatuur en de dauwpuntstemperatuur:

$$[14] \quad T_m = \frac{T + T_d}{2}$$

De dauwpuntstemperatuur is die temperatuur, waarbij lucht met een bepaalde relatieve vochtigheid verzadigd is en dus condensatie optreedt. De dauwpuntstemperatuur kan uit figuur 12.3 worden afgelezen. In deze figuur wordt de waterdampspanning voor verschillende waarden van de relatieve vochtigheid als functie van de temperatuur weergegeven.

Figuur 12.3 Relatie tussen dampspanning van water (e_a), temperatuur (T) en relatieve vochtigheid (%).



In tabel 12.1 worden voor een aantal typische waarden voor K en T_e weergegeven. Deze tabel laat zien, dat K met name erg gevoelig is voor de windsnelheid. Het effect van de relatieve vochtigheid (RV) op K is niet erg groot. Wel heeft RV enige invloed op de evenwichtstemperatuur. Meegeleverd met de set procesbeschrijvingen is een programma (TEQUIL) waarmee K en T_e kunnen worden berekend als functie van de

Tabel 12.1 Warmteoverdrachtsconstante K en Evenwichtstemperatuur voor een aantal typische condities in voorjaar, zomer herfst en winter.

	RV	W	K	TE
Voorjaar TA = 10; FL = 150	60	2	15,60	12,20
	70	2	16,00	14,20
	80	2	16,40	15,90
	90	2	16,70	17,40
	80	5	26,30	12,40
	80	10	61,8	9,1
Zomer TA = 20; FL = 200	60	2	2,60	21,70
	70	2	21,30	23,80
	80	2	22,00	25,60
	90	2	22,60	27,20
	80	5	36,40	22,00
	80	10	87,90	18,70
Herfst TA = 10; FL = 70	60	2	15,60	7,10
	70	2	16,00	9,20
	80	2	16,40	11,00
	90	2	16,70	12,60
	80	5	26,30	9,40
	80	10	61,80	7,80
Winter TA = 5; FL = 30	60	2	14,10	0,00
	70	2	14,30	2,10
	80	2	14,50	3,90
	90	2	14,70	5,50
	80	5	23,10	3,10
	80	10	53,60	2,40

meteorologische condities. Voor een toelichting op dit programma wordt verwezen naar bijlage 3.

12.1.3.2 SURPLUS TEMPERATUUR

Dit is een benadering, die onder meer door het Waterloopkundig Laboratorium (WL) is toegepast op de Maas en is geïmplementeerd binnen het model MODQUAL (WL, 1989). De benadering is een nog verdere versimpeling van de methode volgens Edinger. Uitgangspunt is de volgende vergelijking:

$$[15] \quad \frac{d\Delta T}{dt} = -k_0 \cdot \Delta T$$

waarin: ΔT de surplustemperatuur (°C)
 k_0 een eerste orde snelheidsconstanten (dag⁻¹)

De surplustemperatuur kan worden gezien als de temperatuurverhoging ten gevolge van een thermische lozing. Met deze benadering wordt dus geen absolute temperatuur uitgerekend, maar slechts een temperatuurverhoging. Deze benadering sluit goed aan bij de richtlijnen over warmtelozingen op rivieren, waarin wordt gesteld, dat de temperatuurverhoging niet groter mag zijn dan 3 °C.

De snelheidsconstante k_0 is gelijk aan:

$$[16] \quad k_0 = \frac{A}{z}$$

waarin: z de waterdiepte (m)
 A het zelfkoelingsgetal (m.dag⁻¹)

Het zelfkoelingsgetal heeft hetzelfde karakter als de warmteoverdrachtsconstante in de benadering volgens Edinger. Het WL (1989) meldt, dat voor Nederlandse omstandigheden het zelfkoelingsgetal gemiddeld gelijk is aan 10⁻⁵ m.s⁻¹. Er kan worden afgeleid, dat dit overeenkomt met een K van 42 W.m⁻². Hetgeen typisch een waarde is voor zomerse condities bij een windsnelheid van ca. 5 m.s⁻¹.

12.2 Procesbeschrijvingen

12.2.1 MODEL TEMP volledige warmtebalans

Uitgangspunt voor het dynamische temperatuur model, zoals dat geïmplementeerd is in DUFLOW, vormen de vergelijkingen 2 tot en met 7. Waarbij de dampspanning van water wordt uitgedrukt in mBar in plaats van in mm Hg, zoals wordt weergegeven in vergelijking 7.

Het effect van de bewolgingsgraad op de emissiviteit van de lucht wordt in het model berekend uit de zonneshijnduur. Als maat voor de bewolkinggraad (b) is gebruikt: 1- de fractie van de tijd dat de zon heeft geschinen op een dag. Alhoewel dit formeel niet juist is, geeft dit een redelijke benadering.

In bijlage 1 wordt de DUPROL code van het model weergegeven.

12.2.2 Vereenvoudigde benadering volgens Edinger

In paragraaf 12.1.3 is beschreven op welke wijze een schatting kan worden verkregen van de evenwichtstemperatuur T_e en van de warmteoverdrachtscoëfficiënt K . In deze paragraaf wordt het concept nader uitgewerkt. Voor stationaire condities worden een tweetal eenvoudige vergelijkingen gegeven voor zowel stagnante als stromende systemen, waarmee een eerste schatting van het effect van een warmtelozing kan worden verkregen. Daarnaast wordt de implementatie van een dynamische toepassing van het concept in DUFLOW beschreven. Deze set procesbeschrijvingen wordt meegeleverd als het model TREV.

12.2.2.1 TOEPASSING VOOR STATIONAIRE SITUATIES

Stagnante systemen

De warmte balans voor een doorstroomde ideale menging wordt gegeven door:

$$[17] \quad \frac{\rho \cdot C_p \cdot V \cdot dT}{dt} = [\rho \cdot C_p \cdot Q_i \cdot T_i] - [\rho \cdot C_p \cdot Q \cdot T] - [K \cdot A_s \cdot (T - T_e)]$$

waarin: Q_i het debiet waarmee de menging wordt doorstroomd ($m^3 \cdot s^{-1}$)
 T_i de temperatuur van het doorstroomwater ($^{\circ}C$)
 A_s het uitwisselend oppervlak (m^2)

Wanneer wordt aangenomen dat het volume constant is en dat de meteorologische condities over een zekere periode constant mogen worden verondersteld, geldt dat $dT/dt = 0$. Onder deze semi-stationaire condities kan uit vergelijking 17 worden afgeleid dat:

$$[18] \quad T = \frac{T_i + r \cdot T_e}{1 + r}$$

waar geldt voor r :

$$[19] \quad r = \frac{K \cdot A_s}{\rho \cdot C_p \cdot Q}$$

Met behulp van vergelijking 19 kan uit de temperatuur van het inkomende water (T_i), het uitwisselende oppervlak (A_s), het doorstroomdebiet (Q) en de warmteoverdrachtscoëfficiënt (K), tenslotte de stationaire temperatuur (T_e) worden afgeleid. Vergelijking 19 kan ook andersom worden gebruikt. In dat geval is het mogelijk het benodigde uitwisselend oppervlak te berekenen om een zeker temperatuurverschil over een in- of uitgaande stroom te bereiken.

Stromende systemen

Voor rivieren kan de eenvoudige benadering volgens Edinger worden gebruikt om een schatting te maken van de afstand, waarover het effect van een warmtelozing zich doet gelden. Wanneer we dispersie verwaarlozen geldt onder (gemiddelde) stationaire condities voor het temperatuurverloop als functie van de afstand:

$$[20] \quad u \cdot \frac{dT}{dx} = - \frac{K \cdot (T - T_b)}{\rho \cdot C_p \cdot H}$$

waarin: T_b de achtergrondtemperatuur voor de lozing ($^{\circ}\text{C}$)

Vergelijking 20 kan ook worden geschreven als:

$$[21] \quad \frac{dT}{dx} = -\frac{K_r}{u} \cdot (T - T_b)$$

waarbij K_r wordt gegeven door:

$$[22] \quad K_r = \frac{K}{\rho \cdot C_p \cdot H}$$

Oplossen van vergelijking 21 met als randvoorwaarde op het lozingspunt $x=0$ $T=T_0$ levert:

$$[23] \quad T = (T_0 - T_b) \exp\left(-\frac{K_r \cdot x}{u}\right) + T_b$$

Dit leidt tot hetzelfde resultaat als de in 12.1.3.2. beschreven benadering volgens de surplustemperatuur. Oplossen van de differentiaalvergelijkingen voor het temperatuur surplus vergelijking 15 levert een resultaat geheel analoog aan vergelijking 23. Met deze vergelijking kan dus worden berekend wat de temperatuurverhoging is ten opzichte van de achtergrondtemperatuur.

12.2.2.2 TOEPASSING VOOR DYNAMISCHE SITUATIES (TREV)

De dynamische uitwerking van de benadering volgens Edinger is uitgewerkt in het model TREV. Het model is gebaseerd op vergelijking 15, die ook geschreven kan worden als:

$$[24] \quad \frac{dT_W}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (T_E - T_W)$$

Waarin τ een tijdsconstante, die wordt gegeven door:

$$[25] \quad \tau = \frac{\rho \cdot C_p \cdot Z}{K}$$

12.3 Benodigde invoer

In deze paragraaf wordt slechts de invoer, die specifiek is voor het temperatuurmodel beschreven. Voor de benodigde invoer voor het beschrijven van de waterbeweging wordt verwezen naar de DUFLOW handleiding (STOWA, 1998). Verder wordt voor de specifiek invoer van transport verwezen naar hoofdstuk 1 (over het transport van conservatieve stoffen). Tabel 12.1 geeft een overzicht van de benodigde invoer.

12.3.1 Model TEMP gebaseerd op de volledige warmtebalans

Tabel 12.2 geeft een overzicht van de benodigde invoer van het model TEMP. In het model wordt de temperatuur gesimuleerd als een concentratie, hetgeen op het eerste gezicht wat vreemd lijkt. Echter in het model wordt het transport van warmte gesimu-

leerd (zie vergelijking 1). De grootheid $\rho \cdot C_p \cdot T$ heeft een dimensie van $J \cdot m^{-3}$ en kan worden gezien als een concentratie warmte. Daar ρ en C_p constant worden verondersteld, kan ook de watertemperatuur als een concentratie worden beschreven. Dit betekent, dat ook voor de temperatuur op elke knoop een initiële conditie moet worden opgegeven. De keuze van de begintoestand kan worden gebaseerd op metingen of worden geschat op basis van een aantal inleidende simulaties. In dat laatste geval kan van de optie 'new initial conditions' gebruik worden gemaakt.

Tabel 12.2 Benodigde invoer voor het model TEMP

Type	Naam	Bron
Initiële conditie	Temperatuur waterkolom	Meting Inleidende simulatie
Randvoorwaarden	Temperatuur systeemrand Temperatuur puntlozingen 'Warmte vracht'	Meting
Parameters	RFS Reflectie korte golfstraling	Literatuur 6-10 %
	RFA Reflectie lange golfstraling	Literatuur 3 %
Externe variabelen	FS Korte golfstraling	KNMI of directe meting
	TA Luchttemperatuur	
	RV Relatieve vochtigheid	
	W Windsnelheid op 10 m	
	ZON Fractie dag dat de zon schijnt	
	P Luchtdruk	

Op de randen van het systeem moet in principe voor elke knoop waarop een peil of debiet wordt opgelegd een temperatuur als randvoorwaarde worden ingevoerd. Voor lozingen geldt, dat aan het geloosde debiet een temperatuur moet worden toegekend. Ook kan een lozing worden gesimuleerd door op te geven hoeveel $J \cdot s^{-1}$ op een bepaalde knoop wordt geloosd. Dit toegevoegd vermogen is hetzelfde als een vracht bij het simuleren van een concentratie.

De twee parameters in het model reflectie korte golfstraling (RFS) en reflectie lange golfstraling (RFA) liggen binnen redelijke grenzen vast. In de meeste gevallen kan worden volstaan met het gebruik van de default waarden.

Alle meteorologische condities, die de watertemperatuur beïnvloeden zijn in het model als externe variabele opgegeven. Hierdoor vraagt het model nogal veel invoer, die allemaal als tijdserie kunnen worden ingevoerd. Uit gevoeligheidsanalyse blijkt, dat het model niet erg gevoelig is voor de luchtdruk (P) en voor de fractie van de dag dat de zon schijnt. Dit betekent dat voor deze beide variabelen eventueel met een constante (gemiddelde) waarde kan worden gerekend.

12.3.2 Model TREV gebaseerd op benadering volgens Edinger

Voor de initiële condities en de randvoorwaarde geldt hetzelfde als voor het hierboven beschreven model TEMP. De parameters RHOW en CP zijn uiteraard constanten. De evenwichtstemperatuur (TE) en warmteoverdrachtsconstante (K) dienen als externe variabelen opgegeven te worden. Op deze wijze kunnen ze als functie van de tijd worden ingevoerd.

Tabel 12.3 Benodigde invoer voor het model TREV

Type	Naam	Bron
Initiële conditie	Temperatuur waterkolom	Meting Inleidende simulatie
Randvoorwaarden	Temperatuur systeemrand Temperatuur puntlozingen 'Warmte vracht'	Meting
Parameters	RHOW Dichtheid water CP Soortelijke warmte water	Beide constanten
Externe variabelen	TE Evenwichtstemperatuur K Warmteoverdracht- constante	Berekening volgens vergelijking 10 tot en met 14. Of met TEQUIL

12.4 Voorbeeld

Beide modellen zijn toegepast op een van de proefsloten van het complex de Sinderhoeve te Renkum. Voor dit systeem was een vrij complete data set beschikbaar, die de mogelijkheid bood de modellen te testen.

12.4.1 Situatieschets

De sloot is een zeer eenvoudig systeem met een lengte van 40 m, een breedte van 1,6 m en een diepte van 0,50 m. Het waterpeil in de sloot werd constant gehouden. Hiertoe werd water ingelaten. Echter de verblijftijd in de sloot is zo lang dat bij de simulaties de inlaat van water is verwaarloosd.

12.4.2 DUFLOW invoer

HET NETWERK

Het systeem is geschematiseerd als een rechte bak (1 sectie) met een lengte van 40 m en bodempeil van -0,50 m.

INITIËLE CONDITIES

Zijn in dit voorbeeld niet van belang voor de waterbeweging. De initiële condities voor kwaliteit zijn gelijkgesteld aan de gemeten temperatuur op het tijdstip, waarop de simulatie begint.

RANDVOORWAARDEN

Zijn in dit voorbeeld niet van belang. Er is op beide knooppunten een randvoorwaarde voor het debiet opgelegd om eventueel het effect van doorspoelen te kunnen onderzoeken. Daar dit in het uitgewerkte voorbeeld niet is gedaan hebben beide debieten een waarde nul.

EXTERNE VARIABELEN

De waarde van de dispersie is hoog gekozen om ervoor te zorgen dat het systeem volledig gemengd blijft. Er is gebruikgemaakt van een waarde van $500 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Alle meteorologische condities ingevoerd in het model TEMP zijn afkomstig van het LUW-weerstation aan de Haarweg. Voor de luchtdruk is gebruik gemaakt van een constante waarde van 1030 mBar.

Voor het model TREV zijn de evenwichttemperatuur en de warmteoverdrachtsconstante als tijdserie ingevoerd. Deze zijn berekend met behulp van het programma TEQUIL (zie bijlage 2), waarbij dezelfde weersgegevens zijn gebruikt als voor het model TEMP.

PARAMETERS

Voor beide modellen zijn defaultwaarden gebruikt.

CALCULATION SETTINGS

Voor de kwaliteit is met een tijdstap van 1 dag (24 uur) gerekend. Er is een periode van 1 jaar (1 maart tot en met eind februari) doorgerekend.

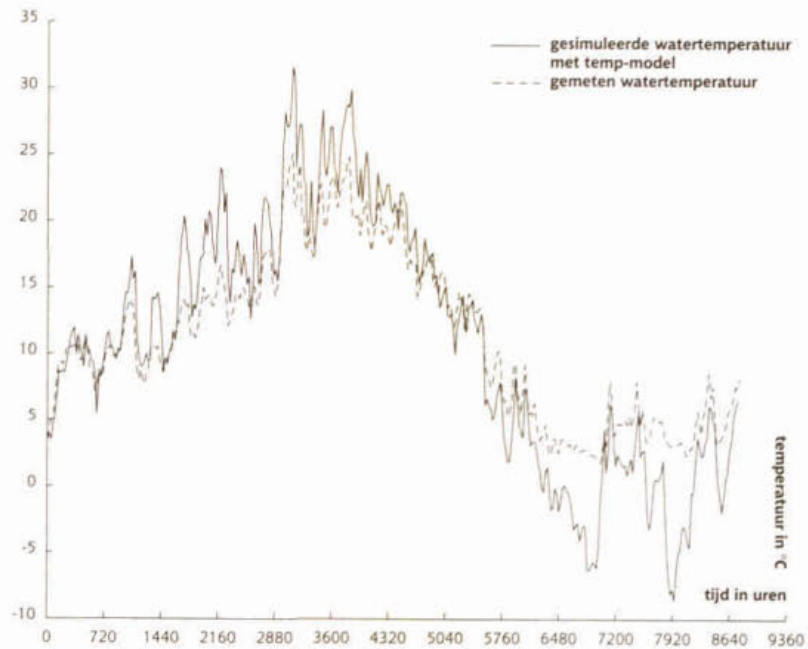
12.4.3 Resultaten

Figuur 12.4 toont de resultaten van het model TEMP. Weergegeven worden zowel het gesimuleerde als het gemeten temperatuurverloop. De resultaten laten zien, dat vooral in de zomer het model het gemeten verloop goed reconstrueert. Voor de wintermaanden wordt de temperatuur enigszins onderschat. Het gesimuleerde verloop toont negatieve temperaturen, terwijl in de gemeten tijdserie de temperatuur niet onder nul komt.

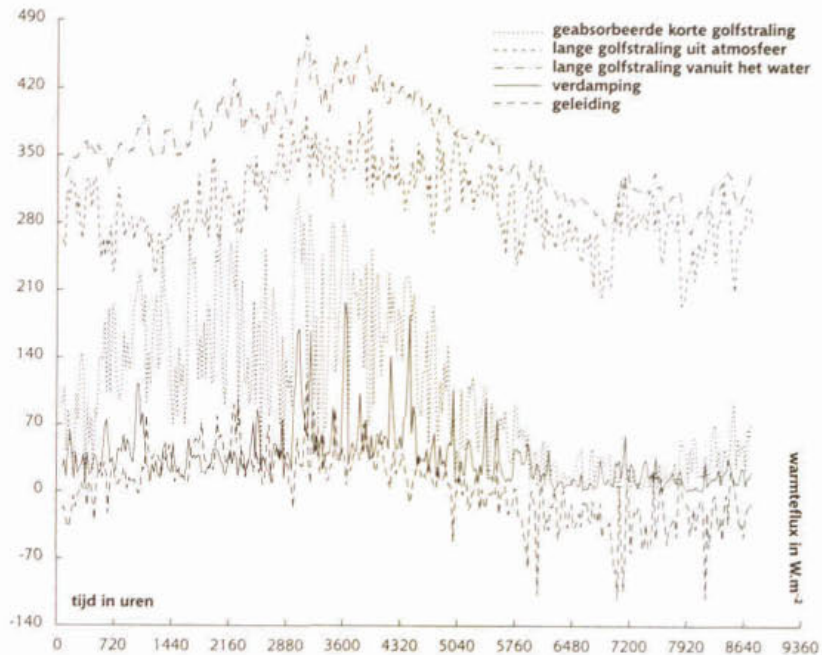
Figuur 12.5 toont de warmtefluxen over het grensvlak water lucht. Uit deze figuur volgt dat geleiding en verdamping de kleinste bijdrage leveren aan de totale warmtebalans. Dit verklaart ook waarom het model niet erg gevoelig is voor de luchtdruk. De lange golfstraling vanuit de atmosfeer en vanuit het water vormen de twee grootste termen in de balans.

In figuur 12.6 worden de resultaten weergegeven van het model TREV. Ondanks dat dit model gebaseerd is op een vereenvoudiging van de totale warmtebalansvergelijking geeft het toch ook een goede beschrijving van het verloop van de temperatuur over het hele jaar. Ook dit model onderschat de temperatuur gedurende de winter-

Figuur 12.4 Gemeten en gesimuleerde watertemperatuur in proefsloot 19 over de periode van maart 1991 tot en met februari 1992.



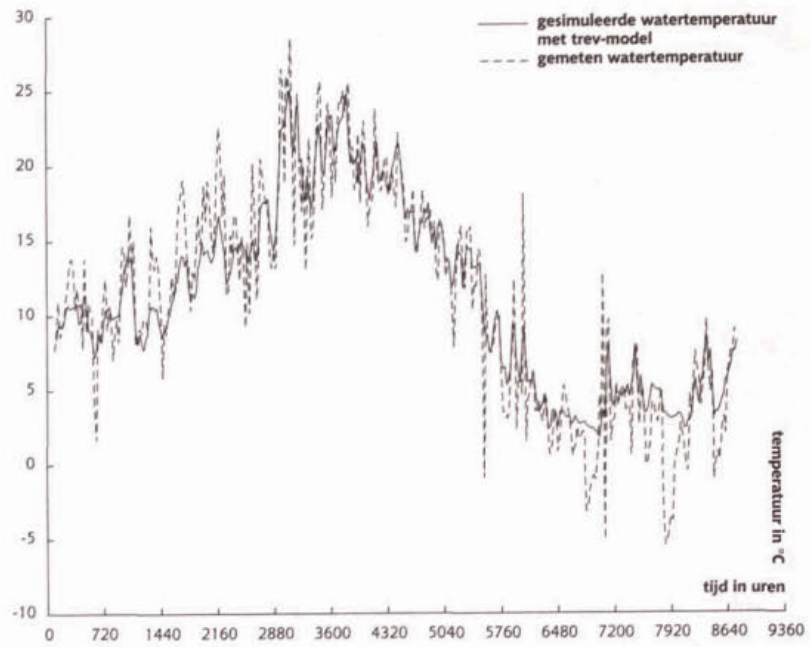
Figuur 12.5 Warmtefluxen over het grensvlak water-lucht in proefsloot 19 over de periode van maart 1991 tot en met februari 1992.



maanden enigszins. Een mogelijke verklaring zou kunnen zijn dat in dit ondiepe systeem, de afgifte van in de bodem opgeslagen warmte een rol van betekenis speelt. Dit proces wordt in het model niet meegenomen. Ook kan er in korte perioden ijsvorming zijn opgetreden, iets wat eveneens niet door het model wordt gesimuleerd.

Figuur 12.6

Gemeten en gesimuleerde watertemperatuur in proefsloot 19 over de periode van maart 1991 tot en met februari 1992.



Literatuur

Brown, L.C., et al, 1987, The Enhanced Stream Water Quality Models Qual2E and Qual2E-UNCAS: Documentation and User Manual, EPA Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Athens, Georgia

Cultuurtechnische Vereniging, 1988, Cultuurtechnisch Vademecum, Utrecht

Edinger, J.E., en Geyer, J.C., 1965, Heat Exchange in the Environment, John Hopkins University, Baltimore, MD

STOWA 1998, Duflow for Windows, Stowarapport 98-19.

Waterloopkundig Laboratorium, 1989, Modelling van de surplus temperatuur met behulp van het model MODQUAL-Maas, Delft

■ Bijlage 1a

Procesbeschrijvingen model TEMP (TEMP.MOD)

```

/*
/* MODEL TEMP (VOLLEDIGE WARMTEBALANS)
/* Watertemperatuur stromende en stagnante watersystemen
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW
/*
/* Landbouwwuniversiteit Wageningen
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie
/* Postbus 8080
/* 6700 DD Wageningen
/*

```

water	TW	[20.0]	oC	:watertemperatuur
parm	RFA	[0.03]	-	:reflectie lange golfstraling
parm	RFS	[0.10]	-	:reflectie korte golf straling
xt	FS	[0.0]	W/m2	:korte golf straling
xt	P	[1020]	mBar	:luchtdruk
xt	RV	[8.0]	%	:relatieve vochtigheid
xt	TA	[20.0]	oC	:luchttemperatuur
xt	W	[2.0]	m/s	:windsnelheid
xt	Zon	[100.]	%	:percentage zonneschijnduur
flow	Z	[1.0]	m	:waterdiepte

```

{
ES= 1.33*0.75*exp(54.721-(6788.6/(TA+273.15))-5.0016*ln(TA+273.15));
EA=RV*ES*0.01;
bw=(100-Zon)/100;
EPSA=(0.53+0.067*EA^0.5)*(1+0.17*bw*bw);
SIGMA=0.0000000567;
RHO=1000;
Cp=4200;
FSnet=(1-RFS)*FS;
FA=epsa*sigma*(TA+273.15)^4;
FAnet=(1-RFA)*FA;
FW=0.97*SIGMA*(TW+273.15)^4;
K=4.4+1.82*W;
FL=K*(ES-EA);
FC=0.000619*P*(TW-TA)*FL/(ES-EA);
FSOM=FSnet+FAnet-FW-FL-FC;
k0(TW)=86400*FSOM/(rho*Cp*Z);
}

```

■ Bijlage 1b

Procesbeschrijvingen model TREV (TREV.MOD)

```
/* */
/* MODEL TREV (EVENWICHTSBENADERING) */
/* Watertemperatuur stromende en stagnante watersystemen */
/* STOWA project uitbreiding procesbeschrijvingen DUFLOW */
/* */
/* Landbouwniversiteit Wageningen */
/* Vakgroep Waterkwaliteitsbeheer en Aquatische Oecologie */
/* Postbus 8080 */
/* 6700 DD Wageningen */
/* */
```

```
water TW [20.0] oC : watertemperatuur
parm CP [4200] J/kg.oC : soortelijke warmte water
parm RHOW [1000] kg/m3 : dichtheid water
xt K [20.0] W/m2.oC : warmteoverdrachtscoëfficiënt
xt TE [20.0] oC : evenwichtstemperatuur
flow Z [1.0] m : waterdiepte
```

```
{
TAU = RHOW*CP*Z/(86400*K);
K1(TW) = -1/TAU;
K0(TW) = TE/TAU;
}
```

■ Bijlage 2

Beschrijving van het programma TEQUIL

Het programma TEQUIL berekent op basis van de meteorologische condities de dauwpuntstemperatuur T_d , de warmteoversdrachtsconstante K en de evenwichtstemperatuur T_e . Voor de theoretische achtergrond en de gebruikte vergelijkingen wordt verwezen naar paragraaf. 6.1.3.

Het programma leest een invoerfile met de naam: METEO.INP.
Hierin worden per regel de volgende gegevens opgegeven:

TA FS RV W

Respectievelijk de luchttemperatuur ($^{\circ}\text{C}$), korte golfstraling ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$), relatieve vochtigheid (%) en de windsnelheid ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$). Deze regel kan naar behoefte worden herhaald, zodat voor meerdere condities de resultaten kunnen worden berekend. Als voorbeeld is een dataset met een jaar daggemiddelde waarden afkomstig van het LUW weerstation Haarweg meegeleverd.

De uitvoer wordt geschreven naar een bestand met de naam: RESULT.DAT.
Per record worden uitgevoerd:

IREC
TD ($^{\circ}\text{C}$)
K ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$)
TE ($^{\circ}\text{C}$)

Het recordnummer, de dauwpuntstemperatuur, de warmteoverdrachtsconstanten en de evenwichtstemperatuur. Voor elke recordregel in de invoerfile worden deze grootheden uitgevoerd.

Het programma wordt opgestart vanuit DOS met:

C> TEQUIL

PROCESBESCHRIJVINGEN DUFLOW VOOR WINDOWS

PCLake

mei 1999

ir. M.H.J.L. Jeuken
drs. J.H. Janse
drs. T. Aldenberg

*Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu (RIVM)
Laboratorium voor Water- en Drinkwateronderzoek (LWD)
Postbus 1 3720 BA Bilthoven*

hoofdstuk

13

hoofdstuk

13

Inhoudsopgave

13.1 Eutrofiëring: PCLake 5

- 13.1.1 Eutrofiëring en herstel van meren 5
- 13.1.2 Karakteristieken van PCLake 6
- 13.1.3 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen van eutrofiëringsmodellen in DUFLOW 7
- 13.1.4 Beperkingen aan ruimtelijke ecologische modellering in DUFLOW 8
- 13.1.5 Technische aspecten bij het gebruik van PCLake in DUFLOW 9

13.2 Procesbeschrijving 9

- 13.2.1 Modelstructuur 10
- 13.2.2 Fytoplankton 11
- 13.2.3 Hogere trofische niveaus 13
- 13.2.4 Vegetatie 15
- 13.2.5 Abiotische en microbiologische processen 16

13.3 Benodigde invoer 18

- 13.3.1 Initiële condities (initial conditions) 18
- 13.3.2 Randvoorwaarden (boundary conditions) 19
- 13.3.3 Parameters 19
- 13.3.4 Ruimte- en tijdsafhankelijke variabelen (external variables) 20

13.4 Voorbeeld Loosdrechtse Plassen 20

- 13.4.1 Invoergegevens 20
- 13.4.2 resultaten 21

13.5 Toekomstige ontwikkelingen 22

Literatuur 24

Bijlagen

Bijlage 1 *Procesbeschrijvingen PCLake* 26

13.1 Eutrofiëring: PCLake

Het model PCLake is een waterkwaliteitsmodel dat is ontwikkeld op het RIVM (Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu). Het model is in eerste instantie gebruikt als hulpmiddel in het WOL-project (Waterkwaliteitsonderzoek Loosdrechtse Plassen) om te verklaren waarom deze geëutrofiëerde meren, die in het verleden helder waren, niet herstellen bij een reductie van de fosfaatbelasting (Janse & Aldenberg, 1990a + b & 1991; Janse et al., 1992; Hofstra et al., 1991; Van Liere & Janse, 1992). Vervolgens is PCLake toegepast in een aantal andere praktijksituaties: de Ankeveense en Kortenhoefse Plassen (Zamurovic-Nenad, 1993; Aysever, 1994), de Reeuwijkse Plassen (Janse et al., 1993; Janse, 1995) en Zwemlust (Janse et al., 1995; Janse et al., 1998). Daarnaast is PCLake toegepast op een dataset van achttien meren (Aldenberg et al., 1995). Algemene informatie over het model is te vinden in Janse & Van Liere (1995), Van der Molen et al. (1996) en Janse (1997).

PCLake werkt in een ACSL-omgeving. Toepassing van het model vergt professionele kennis van dit simuleringsspakket. Om de toepassing van dit model te vereenvoudigen en de mogelijkheden uit te breiden is gebruikgemaakt van DUFLOW. Dit pakket is goedkoper, gebruikersvriendelijker en in de Nederlandse 'waterwereld' bekender dan ACSL. Ook is aansluiting gezocht bij het project van de Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer (STOWA) en de Landbouwniversiteit Wageningen (LUW) om het aantal waterkwaliteitsmodellen voor DUFLOW uit te breiden, waardoor deze beschrijving uiteindelijk aan deze set is toegevoegd. Op een aantal punten zijn de mogelijkheden van DUFLOW beperkter dan ACSL, maar DUFLOW biedt als belangrijk voordeel dat het betrekkelijk eenvoudig is om een ruimtelijk model met meerdere compartimenten op te zetten. Hierbij moet opgemerkt worden dat er nog niet veel praktijkervaring is opgedaan met een ruimtelijke component in PCLake. PCLake verschilt hierin van de modellen van de LUW, die speciaal voor DUFLOW zijn ontwikkeld en waarmee meer ervaring in de praktijk is opgedaan met betrekking tot ruimtelijke spreiding.

13.1.1 Eutrofiëring en herstel van meren

Door de hoge nutriëntenbelasting gedurende tientallen jaren zijn vele ondiepe meren ernstig geëutrofiëerd. Zij worden nu gekenmerkt door groei van blauwalgen, hoge troebelheid, afwezigheid van vegetatie en een vispopulatie die gedomineerd wordt door witvis. Hoewel deze effecten veroorzaakt zijn door hoge nutriëntenbelasting, is herstel van de oude waterplantengedomineerde helderwatertoestand niet te bereiken met een verlaging van de nutriëntenbelasting alleen: geëutrofiëerde meren blijken weerstand te vertonen tegen herstel. Blijkbaar laat de overgang van een systeem van een heldere naar een troebele toestand zich niet zomaar omdraaien (o.a. Jeppesen et al., 1991; Gulati et al., 1990b; De Haan et al., 1993; Boers et al., 1993; Hosper, 1997; Van der Molen et al., 1998). Er is een aantal, elkaar vaak wederzijds beïnvloedende mechanismen waarvan verondersteld wordt dat zij een rol spelen bij deze weerstand. Dit zijn:

- een aanhoudende nalevering vanuit het nutriëntrijke sediment (Ryding & Forsberg, 1977; Sas, 1989)
- een efficiënter gebruik van nutriënten door algen zorgt ervoor dat zij evenveel biomassa produceren met minder nutriënten (Riegman, 1985; Van Liere & Janse, 1992)

- de graasdruk van zoöplankton op algen is laag door de combinatie van slecht eetbare blauwalgen en een hoge predatie door witvis (Gulati et al., 1990a)
- de grote hoeveelheid detritus die zich heeft opgehoopt in het systeem houdt het water troebel, en voorkomt terugkeer van vegetatie (Van Dijk & Van Donk, 1991)

Zowel de directe effecten van nutriënten als de indirecte effecten via het voedselweb leveren een bijdrage aan de weerstand tegen herstel. Daarom worden er soms aanvullende maatregelen zoals actief biologisch beheer of baggeren van sediment overwogen, naast of in combinatie met een verlaging van de nutriëntenbelasting (Gulati, 1990a).

Anderzijds vertonen ook heldere ondiepe meren, gedomineerd door submerse vegetatie, een zekere weerstand tegen externe krachten, zoals bijvoorbeeld een lichte toename in nutriëntenbelasting (Moss, 1990). Ook hier spelen verschillende stabiliserende mechanismen een rol. Vegetatie kan door nutriëntenopname algengroei onderdrukken door nutriëntenlimitering (Van Donk et al., 1993), zij biedt gunstige omstandigheden voor roofvis (Grimm, 1989) en kan de windgeïnduceerde resuspensie verminderen door stabilisering van het sediment (Hosper, 1997).

13.1.2 Karakteristieken van PCLake

PCLake combineert een beschrijving van de dominante biologische componenten met een beschrijving van de nutriëntenkringloop van het ecosysteem van ondiepe meren. Het model is opgebouwd uit de volgende deelsystemen:

- een drietal algengroepen (met variabele nutriëntenratio's)
- het abiotische subsysteem (inclusief de sedimenttoplaag)
- een voedselweb (opgebouwd uit vier functionele groepen)
- één algemene waterplantengroep

Omdat de nutriëntenkringlopen gesloten zijn, kunnen met PCLake de kwantitatieve effecten van eutrofiëring en de meeste herstelmaatregelen berekend worden. Omdat ook de waterbodem dynamisch gemodelleerd wordt is PCLake geschikt voor het berekenen van effecten op de lange termijn (>5 jaar).

De benodigde invoer van het model verschilt niet veel van de invoer voor het eutrofiëringsmodel EUTROF2(A) van de LUW. Naast gegevens over de waterkwantiteit en afmetingen van het systeem zijn met name gegevens over de totale belasting van het systeem met nutriënten en de beginsituatie van belang. Indien men niet over meteorologische veldmetingen beschikt, kan gebruikgemaakt worden van de standaardmetingen van het KNMI. Gegevens over biota dienen in het algemeen niet als invoer. Deze worden gebruikt om de beginsituatie in te schatten, maar worden verder alleen gebruikt om de resultaten van het model te valideren.

De implementatie van PCLake in DUFLOW is niet eenvoudig gebleken. DUFLOW kent een aantal beperkingen waarvoor creatieve oplossingen gezocht moesten worden (Jeuken, 1997). Een aantal technische problemen zal voor de toepassing van PCLake met de DOS-versie van DUFLOW (versie 2.05) blijven bestaan omdat deze versie van DUFLOW niet meer verbeterd zal worden. Deze problemen zullen in paragraaf 13.1.5 worden toegelicht. Het is overigens niet zo dat deze problemen tot inhoudelijke beperkingen hebben geleid. De Windows-versie van DUFLOW is echter volop in ontwikkeling, en in versie 3.2 zullen de meeste technische problemen opgelost zijn. Op het moment van schrijven is deze versie van Duflow echter nog niet beschikbaar.

13.1.3 Toepassingsmogelijkheden en beperkingen van eutrofiëringsmodellen in DUFLOW

Er zijn voor het modelleren van algengroei in DUFLOW tenminste vier modellen beschikbaar. In tabel 13.1 en 13.2 wordt een overzicht gegeven van de karakteristieken en toepassingsmogelijkheden van deze modellen. In deze handleiding zal alleen nader worden ingegaan op de modellen voor de langere termijn (> 1 jaar): EUTROF2(A) en PCLake. Belangrijke criteria bij de keuze zijn ten eerste de aard en eutrofiëringstoestand van het systeem, en ten tweede de vraag welke maatregelen of scenario's men wil kunnen doorrekenen.

Toepassing van PCLake kan met name zinvol zijn voor meren die reeds op weg naar herstel zijn en waarin een toekomstige omslag van algen- naar macrofytendominantie mogelijk is. Daartoe moet de belasting van het watersysteem reeds in redelijke mate zijn teruggebracht en moeten (delen van) het systeem ondiep genoeg zijn (tot enkele meters) om submerse plantengroei mogelijk te maken. Dynamische beschrijving van de ratio's tussen nutriënt en droge stof in algen is eveneens met name van invloed in wateren die 'op de grens' van nutriëntenlimitering zitten. Voor sterk geëutrofiëerde systemen is een eenvoudiger model als EUTROF2 toereikend.

Met EUTROF2 door te rekenen maatregelen als (langetermijn)nutriëntenreductie, baggeren, ver(on)diepen, doorspoelen en fosfaatfixatie zijn in PCLake mogelijk. Daarbij biedt PCLake ook de mogelijkheid om visstandsbeheer (biomanipulatie) te simuleren, alsmede beheer van ondergedoken waterplanten (bijvoorbeeld maaien).

Hoewel PCLake niet veel meer invoer vraagt dan EUTROF2, kost de bewerking van de invoer en het doorrekenen van het model meer tijd (niet alleen in de zin van reken-tijd, maar ook in de zin van het 'voorbereiden' van de invoer).

In EUTROF2 zijn de standaardwaarden van de parameters voor de drie algengroepen gelijk. Dat betekent dat de gebruiker deze parameters zal moeten aanpassen om daadwerkelijk drie algengroepen te modelleren. In PCLake zijn deze drie groepen reeds geparameteriseerd.

Tabel 13.1 Karakteristieken van de modellen (bron: STOWA, 1997)

	EUTROF1	EUTROF2	PUT	PCLake
Algen	1 soort	3 soorten	1 soort	3 soorten
Hogere trofische niveaus	nee	nee	nee	ja
Waterplanten	nee	nee	nee	ja
Sediment-waterinteractie	nee	ja	ja	ja
Stratificatie	nee	nee	ja	nee
C/N C/P verhouding	constant	constant	constant	variabel
Lichtlimitering	daggemiddeld	daggemiddeld	daggemiddeld	daggemiddeld
Verliesterm algen	simpel	complex	complex	complex
Extinctie	simpel	uitgebreid	uitgebreid	uitgebreid
Temperatuur algengroei	θ	optimum	θ	optimum
P-huishouding	simpel	complex	complex	complex
N-huishouding	complex	complex	complex	complex
Si-huishouding	nee	nee	nee	ja

	EUTROF1	EUTROF2	PUT	PCLake
Doorspoelen	ja	ja	ja	ja
Verdiepen	ja	ja	ja	ja
Baggeren		ja		ja
P-fixatie		ja		ja
Successie algen		ja		ja
Lange-termijneffect van reductie		ja		ja
Waterplanten beheer				ja
Biomanipulatie (top/down control)				ja
Ontmenging gestratificeerde systemen			ja	

13.1.4 Beperkingen aan ruimtelijke ecologische modellering in DUFLOW

In DUFLOW is een watersysteem eenvoudig in verschillende compartimenten op te delen. Dit is niet alleen van belang als het vermoeden bestaat dat een meer niet volledig gemengd is. In veel processen speelt bijvoorbeeld de waterdiepte een belangrijke rol. In een model met één compartiment kan maar één gemiddelde waterdiepte opgegeven worden. In een model met meerdere compartimenten is het mogelijk om meerdere waterdiepten op te geven, waarmee bijvoorbeeld een ondiepe oeverzone onderscheiden kan worden waarin waterplanten sneller tot ontwikkeling kunnen komen.

Door uitwisseling tussen de oeverzone en de rest van het systeem kan uiteindelijk het hele systeem worden beïnvloed. Hier komt echter een belangrijk probleem naar voren. Uitwisseling tussen twee compartimenten in DUFLOW is namelijk alleen mogelijk volgens de ingebouwde opties water en bottom. Deze opties staan voor respectievelijk advectief transport met dispersie en geen uitwisseling tussen compartimenten. De eerste is van toepassing op toestandsvariabelen die zich gedragen als volledig opgeloste stoffen, de tweede is voor plaatsgebonden toestandsvariabelen.

Voor abiotische toestandsvariabelen is deze eenvoudige beschrijving over het algemeen voldoende, maar het verspreidingsgedrag van biotische componenten is vaak veel complexer, en er zijn ook veel verschillen tussen de verschillende componenten. Vissen kunnen bijvoorbeeld tegen de stroom in zwemmen, ze kunnen al dan niet scholen vormen, en kunnen in de loop van de dag op een andere plaats foerageren dan waar ze rusten. Wortelende waterplanten zullen zich niet zo snel verplaatsen, maar deze kunnen zich wel op andere manieren verspreiden, waarbij ze wel afhankelijk kunnen zijn van de stromingsrichting. Ook kunnen er barrières bestaan die bepaalde componenten in het water wel en andere niet doorlaten.

Soms is een vereenvoudiging tot water- of bottom-variabelen echter wel te rechtvaardigen. Voor de implementatie van PCLake in DUFLOW is een dergelijk vereenvoudiging op dit moment in ieder geval nog noodzakelijk omdat het niet mogelijk is om andere ruimtelijke relaties in DUFLOW te kiezen of definiëren. Fytoplankton en zoöplankton zullen over het algemeen wel met de stroming meebewegen, en zijn dus water-variabelen. Voor alle andere biotische componenten is aangenomen dat ze nauwelijks door stroming verplaatst worden.

13.1.5 Technische aspecten bij het gebruik van PCLake in DUFLOW

De mogelijkheden van DUFLOW zijn soms beperkt. Dat bleek bij de implementatie van PCLake in DUFLOW. Een aantal problemen zijn met een creatieve oplossing verholpen, en de 'gewone' gebruiker zal hiervan niets merken. Op een aantal punten is dit echter niet gelukt. In de eerste plaats maakt versie 2.04 van DUFLOW bij het rekenen een fout, zodat men minimaal versie 2.05 dient te gebruiken. Voor gebruikers van de Windows-versie van DUFLOW dient opgemerkt te worden dat het in versie 3.0 en 3.1 niet mogelijk is om aanpassingen te maken aan de modelcode, omdat het door een nieuwe fout in DUFLOW niet mogelijk is om het model te compileren. Met versie 2.05 is dit wel mogelijk, en in versie 3.2 zal deze fout hersteld zijn.

Het grootste probleem is dat de namen van toestandsvariabelen, parameters en XT-variabelen niet langer mogen zijn dan 6 letters en dat de namen van de tussenberekeningen niet langer mogen zijn dan 8 letters. Dat betekent dat er in DUFLOW andere namen voor de variabelen van PCLake gebruikt moeten worden. Ook is het niet mogelijk om een toelichting tussen de regels op te nemen. Voor kleine modellen zijn deze beperkingen geen groot probleem, maar bij modellen met een omvang als PCLake (zo'n 1500 namen) levert dit een onleesbaar model op. Er is daarom een voor-compilatieprogramma ontwikkeld dat de uitgebreide modelcode geschikt maakt voor gebruik in DUFLOW. Dat heeft tot gevolg dat de gebruiker in de user-interface van DUFLOW te maken krijgt met minder duidelijke afgekorte variabelennamen, zowel voor de invoer als de uitvoer. Ook dit probleem zal in versie 3.2 van DUFLOW opgelost zijn.

Het grote aantal variabelen van PCLake is voor de user-interface van de DOS-versie van DUFLOW een probleem. Dit is zo groot dat een aantal menuonderdelen niet meer werken. Het grootste probleem is dat het niet mogelijk is om de uitvoervariabelen te selecteren. Ook is het niet mogelijk om veel variabelen tegelijkertijd uit te voeren naar de resultatenfile, omdat dan het OUTPUT-menu niet meer werkt. De enige mogelijkheid om de uitvoer variabelen aan te passen is met een text-editor het *.CTR-bestand te bewerken. Hierbij dient men echter wel de juiste, afgekorte naam op te geven in het juiste formaat van dit bestand. Daarnaast is het niet mogelijk measured-data te koppelen aan zgn. functions. De Windows-versie van DUFLOW kent deze problemen niet.

Ondanks de bovengenoemde problemen is rekenen met PCLake onder DUFLOW goed mogelijk.

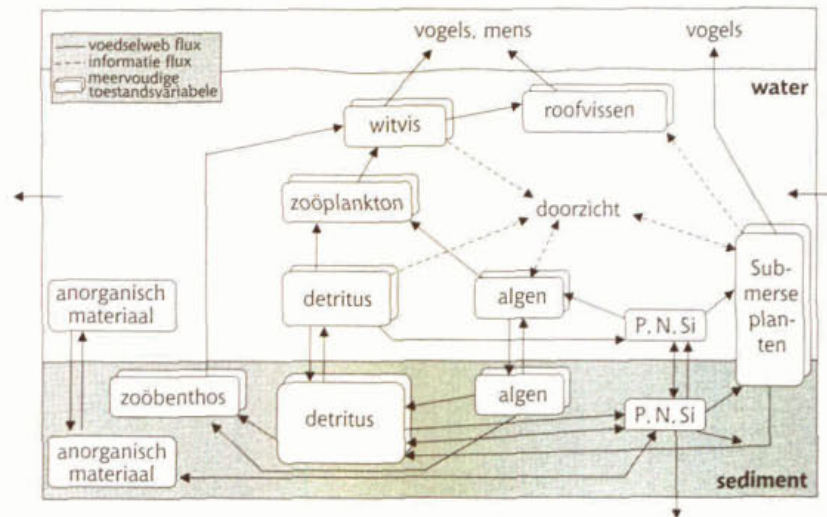
13.2 Procesbeschrijving

In dit hoofdstuk zal globaal beschreven worden hoe PCLake in elkaar zit. Voor de exacte procesformuleringen wordt verwezen naar de modelcode van het model (in bijlage 1/op de bijgeleverde diskette). De laatste beschikbare complete modelbeschrijving is te vinden in Janse & Aldenberg, 1990a + b. Hoewel het model sindsdien veranderd is, zijn de uitgangspunten dezelfde gebleven. De uitbreidingen met de stikstofkringloop en met ondergedoken waterplanten zijn beschreven in Janse & Van Puijenbroek (1997). een aanpassing van de complete modelbeschrijving is in voorbereiding.

13.2.1 Modelstructuur

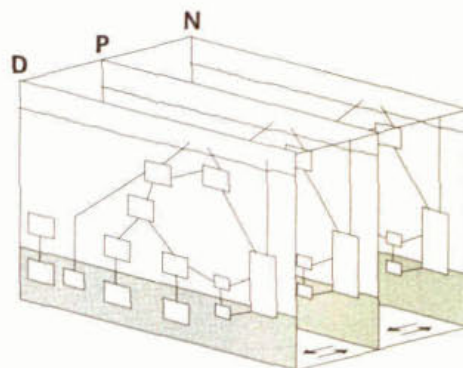
Inhoudelijk sluit PCLake aan bij de LUW-modellen EUTROF1(A) en EUTROF2(A), maar qua opzet is PCLake complexer. Voor de modellen van de LUW geldt als uitgangspunt dat de procesbeschrijvingen zo eenvoudig mogelijk zijn, en dat de modellen in praktijk situaties eenvoudig toepasbaar zijn. Voor PCLake gelden dezelfde uitgangspunten, maar door de bredere doelstellingen van PCLake (zie inleiding) is het model veel uitgebreider geworden. Figuur 13.1 geeft een globaal beeld van de samenhang tussen de verschillende toestandsvariabelen waaruit PCLake is opgebouwd.

Figuur 13.1 Schema van PCLake



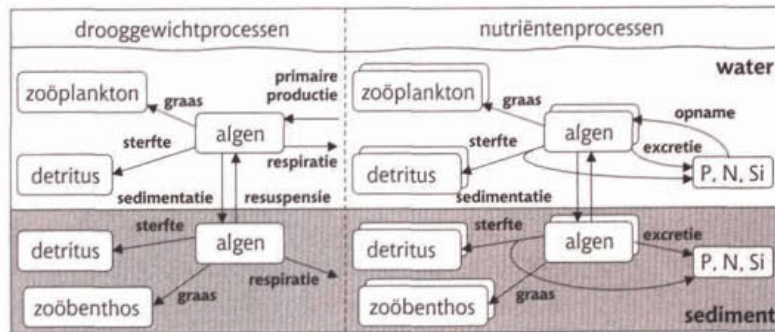
De verhouding tussen nutriënt en droge stof is niet voor alle componenten gelijk. Naarmate men hoger in het voedselweb komt neemt deze verhouding toe (Gulati et al., 1991). In algen en vegetatie is de verhouding niet constant. Door deze verschillen is het noodzakelijk om één of meerdere componenten met variabele ratio's te modelleren om de nutriëntenkringloop te kunnen sluiten (Aldenberg & Peters, 1990). In theorie is het mogelijk om alleen voor detritus met een variabele ratio te werken. Maar in dat geval wordt een aantal fluxen in de nutriëntenkringlopen impliciet gemodelleerd, en dat maakt de kans op ongemerkte fouten in de massabalans groter. Daarom is er voor gekozen om alle componenten met dynamische ratio's te modelleren en

Figuur 13.2 Gelaagde opbouw PCLake (D = droge stof; P = fosfor; N = stikstof)



alle fluxen van alle kringlopen expliciet op te nemen, zodat het opstellen en controleren van de massabalansen eenvoudiger is. Door deze expliciete beschrijving van alle fluxen in de nutriëntenkringlopen kent PCLake een gelaagde opbouw per stof (figuur 13.2). Stofstromen kunnen alleen plaatsvinden binnen één laag. Tussen de lagen vindt alleen 'informatie'-uitwisseling plaats.

Figuur 13.3 Processen van algen



13.2.2 Fytoplankton

Er worden drie groepen algen in het model onderscheiden: blauwalgen (cyanobacteriën), diatomeeën, en overige eetbare algen ('groenalgen'). Voor het drooggewicht van algen is de volgende balans op te stellen (zie figuur 13.3):

$$[1] \quad \frac{d \text{ drooggewicht}}{dt} = \text{assimilatie} - \text{respiratie} - \text{sterfte} - \text{graas} - \text{sedimentatie} + \text{resusensie}$$

Voor de nutriënten van algen geldt voor stikstof en fosfaat de volgende balans:

$$[2] \quad \frac{d \text{ nutriënt}}{dt} = \text{opname} - \text{excretie} - \text{sterfte} - \text{graas} - \text{sedimentatie} + \text{resusensie}$$

Om diatomeeën goed te kunnen modelleren wordt in PCLake ook silicium als nutriënt meegenomen. De siliciumkringloop wordt echter minder uitgebreid beschreven omdat dit alleen wordt opgenomen door diatomeeën, en verder alleen voorkomt in opgeloste vorm (SiO_2) en in detritus. De verhouding tussen silicium en drooggewicht wordt voor diatomeeën constant verondersteld, en hoeft dan ook niet expliciet meegenomen te worden. Alle siliciumfluxen voor diatomeeën worden uitgerekend door de drooggewichtfluxen te vermenigvuldigen met een constante silicium-drooggewichtverhouding. Dit is noodzakelijk omdat de abiotische vormen van silicium wel dynamisch gemodelleerd worden (zie 13.2.5). De balans voor silicium in diatomeeën ziet er dan als volgt uit:

$$[3] \quad \begin{aligned} \frac{d \text{ silicium}}{dt} &= \text{Si/D-verhouding} \cdot \frac{d \text{ drooggewicht}}{dt} \\ &= \text{Si/D-verhouding} \cdot \text{balanst termen van [1]} \end{aligned}$$

De migratieterm is niet in de vergelijking opgenomen, aangezien deze al als transportterm is opgenomen. In de DUFLOW-versie van PCLake worden algen als WATER-variabelen gemodelleerd, en de ruimtelijke verplaatsing in de vorm van advectief en dispersief transport wordt door DUFLOW berekend.

ASSIMILATIE EN OPNAME VAN NUTRIËNTEN

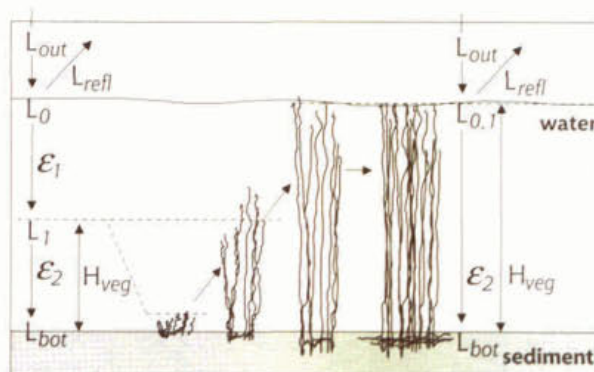
De groei (assimilatie van drooggewicht) van fytoplankton is afhankelijk van de temperatuur en de beschikbaarheid van licht en nutriënten. In EUTROF1 en 2 wordt groei-limitering door nutriënten gemodelleerd op basis van de externe nutriëntenconcentraties volgens een Monod-vergelijking. In PCLake is nutriëntenafhankelijkheid (van fosfaat en stikstof) gemodelleerd als een tweestapsproces volgens het Droop-model. De groei is niet direct afhankelijk van de externe concentraties, maar van de interne 'relatieve concentraties' van nutriënten: de verhoudingen tussen nutriënten en drooggewicht (Riegman & Mur, 1984). De opname van nutriënten wordt apart gemodelleerd en is afhankelijk van de externe nutriëntenconcentraties en de actuele interne gehalten. Voor de opname van stikstof bestaat er een voorkeur voor ammonium. Alleen bij zeer lage ammoniumconcentraties wordt ook stikstof in de vorm van nitraat opgenomen. De afhankelijkheid van diatomeeën van silicium is niet volgens het Droop-model gemodelleerd, maar met een Monod-vergelijking op basis van de externe siliciumconcentratie. Groenalgen en blauwalgen worden niet gelimiteerd door silicium. De uiteindelijke groei-limitering door nutriënten wordt bepaald door het meest limiterende nutriënt.

Voor de relatie tussen lichtinstraling en groei is uitgegaan van de Steele-optimumcurve voor diatomeeën en blauwalgen en een Monod-achtige vergelijking voor groenalgen. Omdat in het veld de beschikbaarheid van licht vooral wordt bepaald door de absorptie van licht in de waterkolom, zijn deze curven geïntegreerd over de diepte, volgens een algemeen gebruikte formulering (bijv. Ambrose et al., 1988). Voor de afhankelijkheid van de temperatuur is gebruik gemaakt van optimumcurven.

LICHTKLIMAAT

De primaire productie wordt voor een belangrijk deel bepaald door het beschikbare licht in de waterkolom. Dit beschikbare licht wordt beperkt door in het water voorkomende zwevende stoffen (anorganisch materiaal en detritus), algen en vegetatie. Voor zwevende stof en algen is verondersteld dat zij homogeen over de waterkolom zijn

Figuur 13.4 tijdens het opkomen van de vegetatie zijn er over de diepte twee extincties



verdeeld. Het effect van vegetatie op het lichtklimaat is echter niet homogeen verdeeld, zowel door de ruimtelijke spreiding als door de grote verscheidenheid aan groeistrategieën. In PCLake is één algemene vegetatiegroep opgenomen, waarvoor is aangenomen dat deze een homogene bijdrage aan de extinctie levert. Alleen tijdens het opkomen van de vegetatie wordt er met twee verschillende extincties gerekend over twee lagen: tussen de vegetatie en er boven (zie figuur 4). Voor beide lagen wordt de lichtuitdoving berekend met de wet van Lambert-Beer.

In het model wordt op basis van de extinctie ook een schatting gemaakt van de Secchi-diepte. Hierbij wordt alleen uitgegaan van de extinctie zonder de bijdrage van de waterplanten, omdat bij meting van de Secchi-diepte waterplanten niet meegenomen (kunnen en mogen) worden.

VERLIESPROCESSEN

De onderhoudsrespiratie is gemodelleerd als een eerste-orde afbraakproces met een temperatuursafhankelijke constante. De uitscheiding van nutriënten is hier wel aan gerelateerd, maar niet altijd volgens de actuele nutriënt-droge-stof-verhouding. Aangenomen is dat bij lage nutriëntengehalten de uitscheiding relatief minder is. Voor sterfte wordt een vaste, temperatuursonafhankelijke, eerste-orde afbraakconstante gebruikt. Bij sterfte zijn nutriënten en droge stof uiteraard wel gerelateerd volgens de actuele nutriëntengehalten. De verliezen van algen door zoöplanktonbegrazing worden beschreven in de volgende paragraaf.

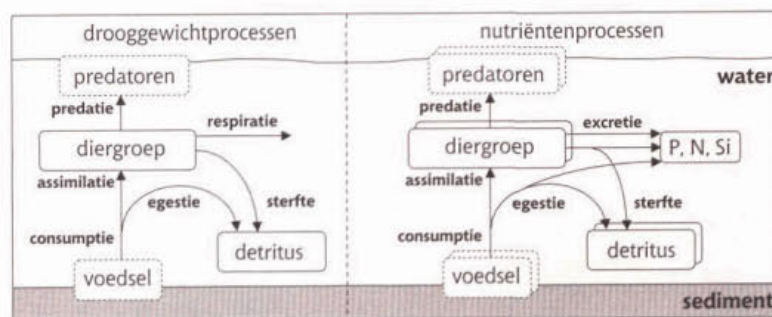
13.2.3 Hogere trofische niveaus

De hogere trofische niveaus van het voedselweb worden gevormd door zoöplankton, witvis en roofvis in de waterkolom, en zoöbenthos in het sediment. Voor deze diergroepen zijn de volgende basisbalansen op te stellen:

$$[4] \quad \frac{d \text{ drooggewicht}}{dt} = \text{assimilatie} - \text{respiratie} - \text{sterfte} - \text{graas} - \text{predatie} \pm \text{resuspensie}$$

$$[5] \quad \frac{d \text{ nutriënt}}{dt} = \text{assimilatie} - \text{excretie} - \text{sterfte} - \text{predatie} \pm \text{resuspensie}$$

Figuur 13.5 Processen van dieren



In figuur 13.5 is een grafische voorstelling van deze balans gegeven. In de volgende paragrafen zullen de verschillende balanstermen worden toegelicht.

CONSUMPTIE EN ASSIMILATIE

Voor diergroepen is de assimilatie afhankelijk van het beschikbare voedsel. Elke groep heeft hierbij bepaalde voorkeuren en beperkingen. Het voedsel voor zoöplankton bestaat uit de drie algensoorten en detritus. Omdat de voorkeur en eetbaarheid (preferentiefactor) van zoöplankton voor blauwalgen veel lager is dan voor de andere algen en detritus, is ook de predatiedruk op blauwalgen lager. Zoöbenthos gebruikt het detritus in het sediment als voedselbron, en wordt samen met het zoöplankton gegeten door witvis. Witvis dient tenslotte zelf als prooi voor roofvis. Verder is aangenomen dat de groei van roofvis positief beïnvloed wordt door de aanwezigheid van vegetatie. Met deze relatie worden habitatfactoren verdisconteerd zoals de noodzaak van waterplanten voor schuilgelegenheid en ei-afzetting van de vissen (Grimm, 1989). Voor alle diergroepen is een logistische groeicurve aangenomen met behulp van een zogenaamde dichtheidscorrectie. Hiermee wordt een aantal niet expliciet gemodelleerde factoren verdisconteerd, zoals de maximale dichtheid van een diergroep. Wanneer de biomassa van een groep boven een bepaald (natuurlijk) maximum uitgroeit, neemt de assimilatie af en de sterfte toe, zodat de groep niet boven het maximum uit kan groeien (Traas & Aldenberg, 1992).

De consumptie van voedsel door dieren is niet gelijk aan de assimilatie omdat de opname niet volledig efficiënt is. De niet-verteerde fractie wordt uitgescheiden als organisch materiaal (egestie). Van de niet-verteerde nutriënten wordt een deel uitgescheiden als anorganische nutriënten.

VERLIESPROCESSEN

Naast het verlies door predatie zijn er nog andere verliestermen op de balans te vinden. De onderhoudsrespiratie is net als bij algen gemodelleerd als een eerste-orde verliesproces met een temperatuursafhankelijke constante. Net als bij algen wordt ook door dieren excretie van nutriënten onderdrukt bij lagere ratio's. Sterfte is in principe gemodelleerd als een eerste-orde verliesproces met een temperatuursonafhankelijke constante. Voor vissen is er een seizoensvariatie in de sterfte omdat deze na de paaitijd hoger is. Uiteraard zijn bij sterfte de nutriënten en droge stof gerelateerd volgens de actuele nutriëntengehalten.

MIGRATIE

Bij PCLake simulaties in ACSL wordt er uitgegaan van één gemengd watersysteem, waarin voor alle toestandsvariabelen wordt verondersteld dat zij homogeen verdeeld zijn. Migratie binnen het systeem hoeft dan ook niet berekend te worden. In DUFLOW zou migratie van dieren binnen het systeem wel gemodelleerd moeten worden, maar binnen de huidige mogelijkheden van DUFLOW is dit nog niet goed mogelijk (zie paragraaf 13.5). Voor de migratie over de grenzen van het systeem wordt in de ACSL-versie van PCLake gebruik gemaakt van een constante zogenaamde externe dichtheid. Deze migratie is met name bedoeld om te voorkomen dat een functionele groep kan uitsterven ('Ark van Noach'). Hoewel dit niet geheel correct is, met name voor punten die niet aan de rand van het systeem liggen, is dit in de DUFLOW-versie van PCLake onveranderd overgenomen.

VISSERIJ EN VOGELS

Visserij door mensen en vogels is samengevoegd tot één eerste-orde verliesproces. Dit proces zou ook gebruikt kunnen worden om actief biologisch beheer te modelleren.

13.2.4 Vegetatie

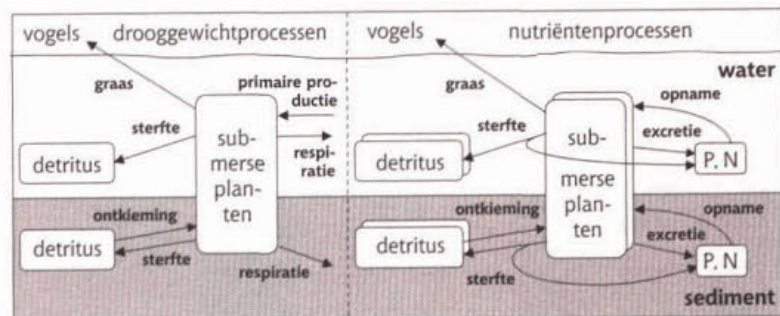
De massabalansen voor vegetatie zien er als volgt uit:

$$[6] \quad \frac{d \text{ drooggewicht}}{dt} = \text{assimilatie} - \text{respiratie} - \text{sterfte} - \text{graas} + \text{ontkieming} \pm \text{migratie}$$

$$[7] \quad \frac{d \text{ nutriënt}}{dt} = \text{assimilatie} - \text{excretie} - \text{sterfte} - \text{graas} + \text{ontkieming} \pm \text{migratie}$$

Zoals in figuur 13.6 te zien is vinden nutriëntenopname, afsterving en respiratie zowel in de bodem als in de waterkolom plaats. Assimilatie vindt alleen in de waterkolom plaats. De verhouding tussen onder- en bovengrondse delen wordt constant verondersteld, waarmee impliciet de allocatie van de assimilatieproducten van de bladeren naar de wortels wordt gemodelleerd. Omdat er over het algemeen relatief meer nutriënten opgenomen worden door de wortels dan door de bladeren, wordt hiermee ook de allocatie van nutriënten van de wortels naar de bladeren verdisconteerd.

Figuur 13.6 Vegetatieprocessen



De vegetatie kan samengesteld zijn uit vele soorten met een grote verscheidenheid aan groeistrategieën. In PCLake is vegetatie vereenvoudigd opgenomen in de vorm van één algemene vegetatiegroep. In meren is vooral de concurrentie tussen algen en waterplanten en algen onderling van belang. In het model PCDitch dat ook door het RIVM is ontwikkeld worden wel meerdere groepen vegetatie onderscheiden. Dit model is vooral bedoeld voor de modellering van sloten, waarbij de concurrentie tussen waterplanten een belangrijke rol speelt (Janse & Van Puijenbroek, 1997). In principe is het mogelijk om ook in PCLake meerdere waterplanten te onderscheiden, maar in de huidige versie wordt uitgegaan van één waterplantengroep.

ASSIMILATIE

Assimilatie vindt alleen in de waterkolom plaats. Door de vaste verhouding tussen de wortels en de submerse delen van de waterplanten worden assimilatieproducten impliciet verdeeld over de gehele plant. Ook voor vegetatie is een logistische groei aangenomen. De beschikbaarheid van licht en nutriënten kan de groei beperken.

OPNAME VAN NUTRIËNTEN

De groei en nutriëntenopname van waterplanten is zoveel mogelijk analoog aan die van algen beschreven. Deze processen zijn dus ook voor waterplanten losgekoppeld volgens het Droop-model. Opname van nutriënten vindt plaats vanuit het oppervlaktewater en het poriënwater, afhankelijk van de beschikbaarheid, de spruit/wortel-verhouding en de interne nutriëntengehaltes. Aangenomen is dat ook nutriënten zich over de hele vegetatie (boven- en ondergrondse delen) verspreiden.

LICHTKLIMAAT

Het lichtklimaat heeft een belangrijke invloed op de groei en het voorkomen van waterplanten, maar andersom kunnen waterplanten direct en indirect ook een belangrijke invloed op het lichtklimaat hebben (zie ook 13.2.2).

Voor het lichtklimaat van waterplanten speelt ook de hoogte van de waterplanten een rol. Verondersteld wordt dat bij lage biomassa de waterplanten niet volledig over de waterkolom verdeeld zijn. Kleine waterplanten ondervinden namelijk nadeel van het feit dat zij verder van het wateroppervlak verwijderd zijn en dus te maken hebben met een ongunstiger lichtklimaat. Dit maakt de drempel voor waterplanten om op te komen hoger. Waterplanten dragen zelf ook bij aan de extinctie, maar door de lage specifieke extinctie (lichtuitdoving per biomassa) is deze bijdrage vaak klein.

Aangenomen is dat waterplanten het lichtklimaat indirect verbeteren door remming van de resuspensie van bodemmateriaal (zie 13.2.5)

KIEMING EN AFSTERVING

Waterplanten kennen een aantal seizoensgebonden processen, zoals het verplaatsen van biomassa naar overwinteringsorganen in het najaar en het ontkiemen hiervan in het voorjaar. Dit soort processen wordt vaak aangestuurd door de (gemiddelde) temperatuur of de daglengte. In PCLake zijn deze processen vereenvoudigd opgenomen. Er is een lage zomersterfte en een hoge wintersterfte aangenomen, en in het voorjaar treedt er een ontkiemingproces op. Bij dit laatste treedt er een flux op van sediment-detritus naar de waterplantenbiomassa.

13.2.5 Abiotische en microbiologische processen

Abiotische en microbiologische processen zijn (op adsorptie na) zo eenvoudig mogelijk beschreven. De processen die in PCLake zijn opgenomen zijn: adsorptie (alleen voor fosfaat), mineralisatie, nitrificatie, denitrificatie, resuspensie, sedimentatie, begraving, infiltratie en diffusie.

ADSORPTIE

In PCLake wordt verondersteld dat alleen opgelost fosfaat adsorbeert. Adsorptie van ammonium is verwaarloosd. Het fosfaat wordt zowel in de waterkolom als in de sedimentlaag gebonden aan detritus en anorganisch materiaal.

Adsorptie kan op vele manieren beschreven worden. Er kan gekozen worden tussen een dynamische beschrijving of instantane partitionering, en er kan gekozen worden tussen lineaire en niet-lineaire isothermen. In PCLake wordt adsorptie dynamisch beschreven met de niet-lineaire Langmuir-isotherm. Met deze isotherm wordt rekening gehouden met een maximale adsorptiecapaciteit.

Dynamische modellering van adsorptie kent echter een groot nadeel: omdat het

meestal het snelste proces van het model is, is het erg bepalend voor de keuze van de tijdstap. ACSL biedt de mogelijkheid om tijdens het rekenen de tijdstap aan te passen aan de actuele snelheid van de processen. Hieruit blijkt dat slechts gedurende korte periodes voor kleinere tijdstappen wordt gekozen. Voor DUFLOW zou echter de kleinste tijdstap voor de gehele rekenperiode gekozen moeten worden, wat leidt tot een lange doorrekening. De semi-dynamische Clasen-methode voor snelle processen (Di Toro, 1976) biedt hiervoor een oplossing. Voor deze berekening is het echter noodzakelijk dat alle fluxen die invloed hebben op de toestandsvariabelen bekend zijn. Dit is in DUFLOW alleen het geval voor BOTTOM-variabelen, omdat WATER-variabelen worden beïnvloed door transport-fluxen waarvan de precieze omvang niet beschikbaar is in de procesbeschrijving. Daarom is de Clasen-methode gebruikt voor de adsorptie in de bodem, terwijl in de waterkolom een volledig dynamische beschrijving wordt gehanteerd. Hoewel het model hierdoor niet meer volledig symmetrisch is wat betreft adsorptie, is dit in de DUFLOW-versie toch op deze wijze gemodelleerd, omdat het model hierdoor in belangrijke mate stabiel wordt.

MINERALISATIE, NITRIFICATIE EN DENITRIFICATIE

Zowel in het sediment als in het water wordt detritus afgebroken als gevolg van een temperatuurgestuurde mineralisatie. In de bodem wordt detritus minder snel afgebroken dan in de waterkolom. Nutriënten komen bij mineralisatie vrij als opgelost fosfaat en ammonium.

De omzetting van ammonium in nitraat (nitrificatie) vindt alleen plaats onder aërobe omstandigheden. De omzetting van nitraat in stikstof-gas vindt alleen plaats onder anaërobe omstandigheden. In PCLake wordt geen zuurstofhuishouding bijgehouden, maar er wordt aangenomen dat de waterkolom volledig aëroob is en de sedimentlaag anaëroob. Derhalve vindt nitrificatie alleen plaats in de waterkolom en denitrificatie alleen in de sedimentlaag.

RESUSPENSIE, SEDIMENTATIE EN BEGRAVING

In ondiepe meren wordt de resuspensie in belangrijke mate aangestuurd door de wind. De relatie tussen windsnelheid en resuspensie is echter complex, en er bestaat ook weinig overeenstemming zoals ook al te lezen is in de beschrijving van het LUW-DUFLOW-model SLIBMEER (Blom & Icke, 1996). Eventueel zou met dit model een beeld verkregen kunnen worden van de sedimenthuishouding van het meer. In PCLake wordt resuspensie zeer eenvoudig beschreven met een gemiddelde waarde. De resuspensie wordt echter wel hoger door graas van witvis (omwoelen van de bodem) en lager door de aanwezigheid van vegetatie (verstevigd de bodem). De totale resuspensie wordt evenredig verdeeld over detritus en het anorganisch materiaal. Om te voorkomen dat de sedimenttoplaag volledig kan verdwijnen, vindt onder een bepaalde minimumdikte geen resuspensie meer plaats.

Sedimentatie wordt bepaald door de valsnelheid en de concentratie in het oppervlaktewater. Indien de sedimenttoplaag dikker wordt dan de opgegeven maximum dikte, wordt verondersteld dat de onderkant van de toplaag zich door begraving bij het diepere sediment voegt en daarmee een verliesterm voor het systeem oplevert.

DIFFUSIE EN INFILTRATIE

Voor opgeloste fosfaat, ammonium en nitraat worden concentratieverschillen tussen oppervlaktewater en poriewater vereffend door diffusie. De parameters zijn belangrijk

hoger dan de moleculaire diffusieconstanten, om ook bioturbatie-effecten te verdisconteren.

Bij infiltratie verplaatst zich poriewater van de sedimenttoplaag naar de diepere sedimentlagen, waarmee alleen de opgeloste stoffen mee gaan. een gelijk watervolume wordt hierbij vanuit de waterkolom naar het poriewater 'getrokken', met medeneeming van zowel opgeloste als gesuspendeerde stoffen die daarin aanwezig zijn.

In DUFLOW is het niet mogelijk om infiltratie als een gewone, negatieve randvoorwaarde (Q_{add}) met daaraan gekoppelde concentraties op te geven, omdat de in het water voorkomende stoffen niet direct uit het systeem verdwijnen. Infiltratie moet daarom, net als verdamping, als een negatieve randvoorwaarde zonder gekoppelde concentraties opgegeven worden. In de procesbeschrijving worden vervolgens de bijbehorende fluxen van water naar sediment en sediment naar het diepere sediment berekend. De gebruiker dient er echter wel zelf zorg voor te dragen dat de opgegeven infiltratie (onder de XT-variabelen in mm/dag) overeenkomt met de opgegeven negatieve randvoorwaarde (m^3/sec).

13.3 Benodigde invoer

Voor veel invoergegevens geldt, net als in veel andere modellen, dat de in het model gekozen toestandsvariabelen (en eventuele parameters en XT-variabelen) niet altijd aansluiten bij wat er in de praktijk gemeten wordt (of kan worden). Helaas kan niet altijd worden volstaan met een eenvoudige omrekening, maar zullen een aantal inschattingen gemaakt moeten worden.

Om het model toe te kunnen passen zijn tal van gegevens nodig. Als basis zijn er gegevens nodig over de systeemkenmerken zoals oppervlakte, bodemprofiel, waterpeilen en diepten. Ten tweede gegevens over de waterkwantiteit (debieten en/of peilen aan de rand van het systeem) en eventuele infiltratie. Verder nog meteorologische gegevens (instraling, temperatuur), de belasting van het systeem (concentraties of vrachten) en de beginsituatie (met name van de sediment-toplaag). De procesparameters kunnen in het algemeen constant gehouden worden.

In bijlage 1 is de volledige modelbeschrijving te vinden. Deze begint met een overzicht van alle toestandsvariabelen en parameters, met een (Engelstalige) beschrijving. Ook alle procesberekeningen in het model zijn voorzien van een beschrijving. Voor de naamgeving van alle variabelen is een systematiek toegepast die aan het einde van de modelcode wordt toegelicht. Voor een overzicht van typische waarden voor parameters wordt verwezen naar deze modelcode. Hieronder volgen enkele aanbevelingen over de benodigde invoer van het model.

13.3.1 Initiële condities (initial conditions)

De aanbevelingen voor de keuze van initiële condities zijn dezelfde als die voor EUTROF2. Voor de volledigheid zijn ze hier vrijwel letterlijk overgenomen van Hans Aalderink. Aansluitend volgt een toelichting over de initiatie van adsorptie in het model.

Voor alle toestandsvariabelen moet op het tijdstip van de aanvang van de simulatie een waarde worden opgegeven. In sommige gevallen kan dat op basis van metingen. Voor complexe netwerken is dit echter niet eenvoudig. (Voor PCLake geldt boven-

dien dat een aantal toestandsvariabelen niet eenvoudig te meten zijn.) in deze gevallen kan een schatting verkregen worden met een aantal inleidende simulaties. Het gebruik van de optie NEWINITS, te vinden in het MASTER MENU is hierbij handig. Men dient er rekening mee te houden dat met name in systemen met een lange verblijftijd het effect van een foute keuze van de initiële condities lang kan doorwerken in de resultaten van de simulatie. In het model voor een conservatieve stof geldt dat de insteltijd slechts bepaald wordt door transport. In EUTROF2 (en PCLake) zijn met name de processen bepalend voor deze insteltijd. Feitelijk is het langzaamste proces bepalend. Voor dit model geldt dat met name de processen in het sediment en de sediment-water-uitwisseling langzaam zijn. Dit betekent dat de resultaten sterk afhankelijk kunnen zijn van de keuze van de beginconcentraties in het sediment. Deze dienen dan ook nauwkeurig te worden vastgesteld, hetgeen de nodige meetinspanning vergt. Probleem hierbij is dat met name het vaststellen van poriewaterconcentraties ingewikkelde experimentele technieken vereist, die niet altijd voorhanden zijn. Eventueel kan voor deze variabelen inrekenen van het model uitkomst bieden. Het is in dat geval wel verstandig om de gevoeligheid van de gemaakte aannames te onderzoeken (Aalderink, 1998).

Het model kan direct instabiel worden indien er geen evenwichtige waarden voor opgelost en geadsorbeerd fosfaat worden gekozen. Om dit te voorkomen wordt de mogelijkheid geboden om een initiële berekening maken waardoor het sorptie-systeem in evenwicht begint. Als initiële waarden worden opgelost fosfaat in oppervlakte- en poriewater opgegeven. Voor geadsorbeerd fosfaat (in water en bodem aan anorganisch materiaal en detritus) wordt de waarde nul opgegeven en ook de P-adsorptie-initiatie-flag wordt op nul gezet. Tijdens de eerste berekening worden de initiële waarden doorgegeven aan de state-variabelen en wordt de P-adsorptie-initiatie-flag op één gezet. Indien de initiële waarde van de P-adsorptie-initiatie-flag één is wordt er niet geïnitieerd.

13.3.2 Randvoorwaarden (boundary conditions)

Ook voor de randvoorwaarden van PCLake kan aangesloten worden op de toelichting van Hans Aalderink op EUTROF2. Op de geografische randen moet de toestand van het systeem worden opgegeven. Verder moeten ook voor puntlozingen concentraties of vrachten worden opgegeven. Voor elke debiet- of peilrand in het model moet (in principe) aan elke toestandsvariabele in de waterkolom een waarde worden toegekend. Vaak worden niet alle in het model gebruikte toestandsvariabelen ook in de praktijk gemeten. Dit betekent dat de concentraties van een aantal onderscheiden variabelen moet worden geschat op basis van wel gemeten grootheden.

13.3.3 Parameters

PCLake is zodanig opgezet dat de meeste parameters niet in elke situatie opnieuw gekalibreerd hoeven te worden. Dit hoeft echter niet altijd op te gaan. Het voedselweb en de vegetatie zijn dusdanig gegeneraliseerd beschreven dat het model niet opgaat indien binnen een functionele groep één bepaalde soort met (sterk) afwijkende kenmerken domineert. Het kan dan nodig zijn om de parameters aan te passen. Indien gewenst kan in het model een bepaalde functionele groep, net als algen, worden opgesplitst in twee of meerdere soorten met een eigen parametrisering.

13.3.4 Ruimte- en tijdsafhankelijke variabelen (external variables)

Als er geen meteorologische gegevens (instraling en temperatuur) uit het veld beschikbaar zijn, kan gebruik gemaakt worden van de standaardmetingen van het KNMI. De watertemperatuur kan ook worden afgeleid uit meteo-gegevens en de waterdiepten met behulp van de LUW-modellen voor watertemperatuur TEMP of TREV.

13.4 Voorbeeld Loosdrechtse Plassen

Voor dit voorbeeld is gebruik gemaakt van gegevens uit het WOL-project (Van Liere & Gulati, 1992) rond de Loosdrechtse Plassen. Deze gegevens zijn al eerder gebruikt bij de eerste toepassing van het model PCLake, dat toen nog PCLoos heette. Deze is beschreven in Janse et al. (1992). In dit voorbeeld worden dezelfde gegevens nogmaals gebruikt, nu voor toepassing van het (inmiddels uitgebreide) model zoals in deze handleiding beschreven.

Een beperking van dit voorbeeld is echter dat het WOL-project zich voornamelijk heeft gericht op fosfaat (en chloride voor de kalibratie van de waterbalans). De eerste versies van PCLake (toen nog PCLoos genaamd) kenden nog geen stikstofberekeningen. Deze zijn pas later opgenomen. Verondersteld wordt dat stikstof in de Loosdrechtse Plassen niet limiterend is.

13.4.1 Invoergegevens

De Loosdrechtse Plassen, gelegen tussen Utrecht en Amsterdam, bestaan uit een hoofdplas met een oppervlakte van ca. 1000 hectare en een diepte van ca. 2 meter, die in verbinding staat met enkele kleinere plassen. Sinds de jaren 1960 is het systeem troebel door eutrofiëring. Het wordt thans gedomineerd door draadvormige blauwalgen en een visstand van vnl. witvis (brasem). De vroeger aanwezige submerse vegetatie is vrijwel verdwenen. Sinds de jaren 1970 wordt de externe belasting aangepakt door o.a. riolering, en vanaf 1994 ook door defosfatering van inlaatwater.

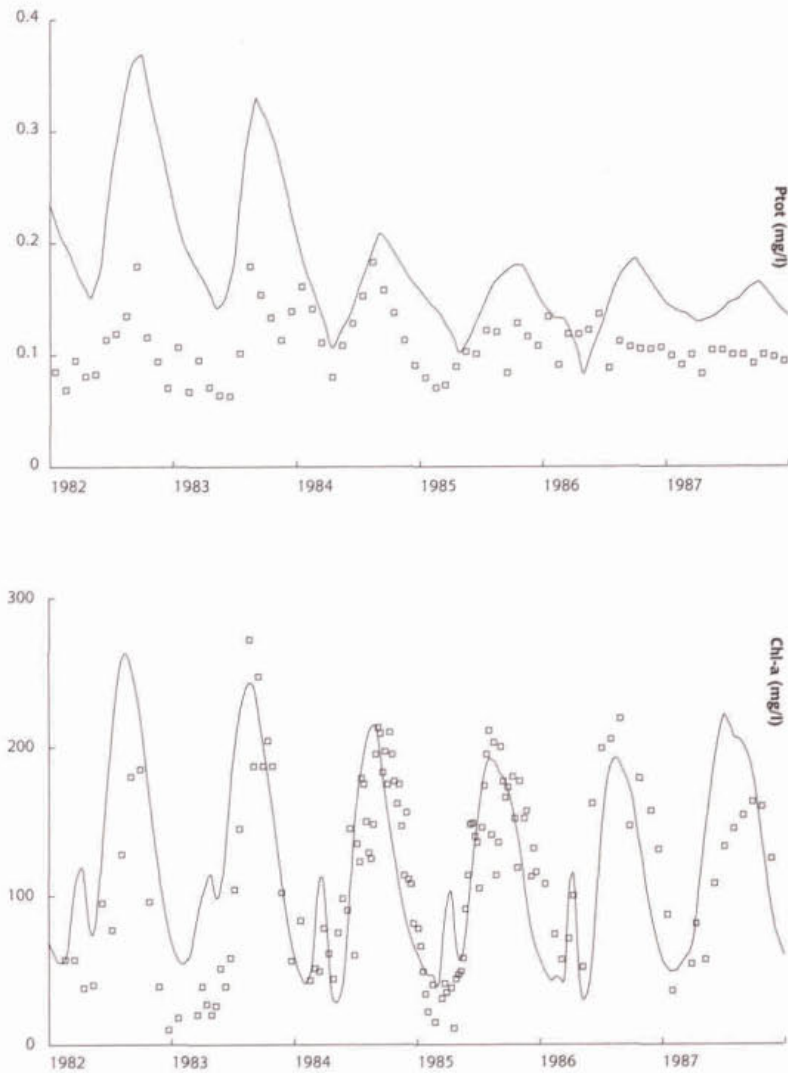
In de schematisatie is alleen de hoofdplas opgenomen. Deze is als één compartiment gemodelleerd. Op deze manier vertoont het model de grootste overeenkomst met de eerdere modeltoepassing omdat de effecten van de ruimtelijke component dan vrijwel 'uit' staan. Als invoer is gebruikgemaakt van maandelijkse waterbalansen en totaal fosfaatbalansen over de periode januari 1982 tot december 1987 (Buyse, 1988). Daarnaast is gebruik gemaakt van meetgegevens over de watertemperatuur (veldmetingen) en de instraling (KNMI). Overige meetgegevens zoals Secchi-diepte, chlorofyl-a, opgelost fosfaat, totaal fosfaat en zoöplankton zijn gebruikt ter controle van de resultaten.

13.4.2 Resultaten

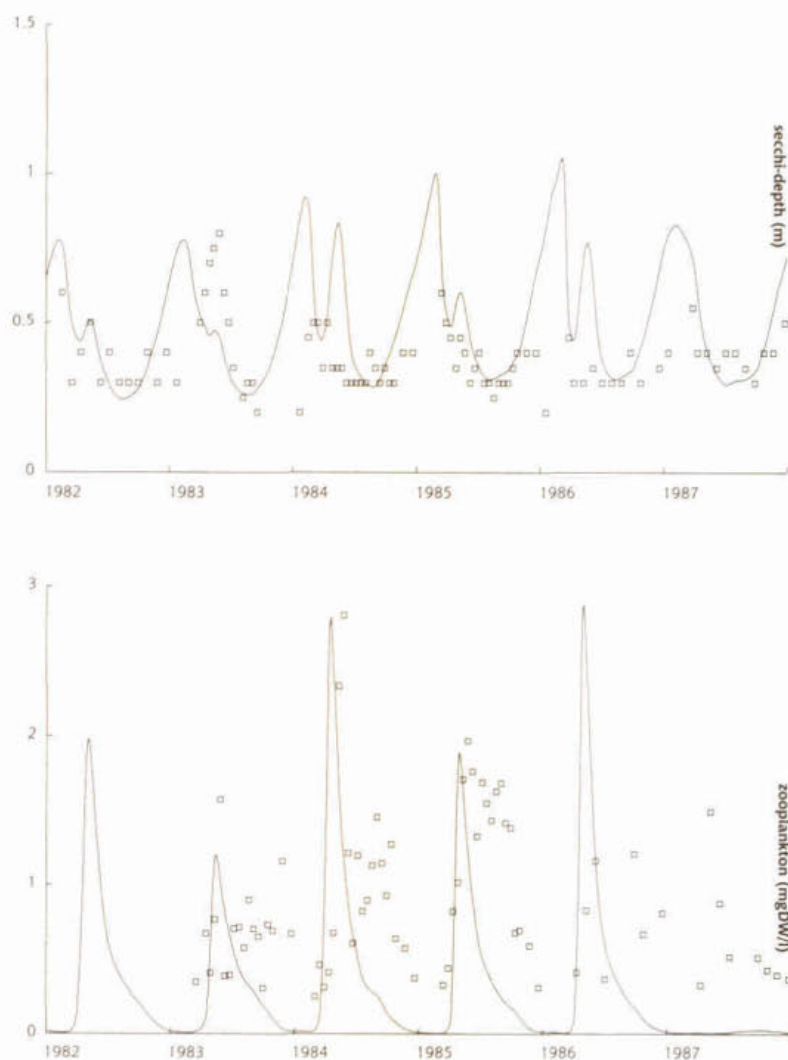
De resultaten voor een viertal variabelen zijn weergegeven in figuur 7a-d (blokjes = metingen, doorlopende lijn = modelresultaten). In de eerste twee jaren wordt totaal fosfaat onderschat, maar de metingen uit die periode zouden onbetrouwbaar zijn en een onderschatting geven (pers. med. L. van Liere). In het laatste jaar wordt chlorofyl

licht overschat, en zooplankton onderschat. Voor zooplankton geldt overigens dat de hoogte van de piek goed berekend wordt, maar niet zo lang aanhoudt als gemeten wordt. Het chlorofyl bestaat, overeenkomstig de waarnemingen voornamelijk uit blauwalgen, met in het voorjaar ook diatomeën.

Figuur 13.7a-b Loosdrechtse Plassen, totaalfosfaat en chlorofyl-a



Figuur 13.7c-d Resultaten voor de Loosdrechtse Plassen, Secchi-diepte en zoöplankton



13.5 Toekomstige ontwikkelingen

TOEKOMSTIGE UITBREIDINGEN EN VERBETERINGEN VAN PCLAKE

Er bestaan op dit moment een aantal ideeën over mogelijke uitbreiding en verbetering van PCLake. Ook praktijkervaringen die met het model worden opgedaan en gebruikerswensen zullen daaraan kunnen bijdragen, alsmede eventuele toekomstige uitbreidingen van de mogelijkheden van DUFLOW zelf. Gebruikers worden aangemoedigd om wensen of suggesties terug te koppelen naar STOWA of RIVM/LWD. Het ligt in de bedoeling om binnen een à twee jaar een vernieuwde versie van PCLake te laten verschijnen waarin (een deel van) deze ideeën zullen zijn verwerkt.

Onderdelen waar op dit moment concreet aan gedacht of gewerkt wordt zijn:

- Verdere validatie op met name heldere meren. Doordat de meeste Nederlandse meren thans troebel zijn (of tot voor kort waren), zijn heldere meren ondervertegenwoordigd in de dataset waarop het model tot nu toe toegepast en getoetst is. Hierdoor

was een goede validatie van alle aspecten nog slechts beperkt mogelijk. Er zal een nadere validatie worden uitgevoerd op een ruimere set meren, waarvan in ieder geval een groter aantal heldere meren uit binnen- en zo mogelijk ook buitenland deel zal uitmaken.

- De functionele groep 'blauwalgen' is nu gedefinieerd als de draadvormige cyanobacteriën (de *Planktothrix*-groep). Het is de bedoeling om daarnaast – optioneel – een groep 'drijfslagvormers' en een groep 'stikstoffixeerders' te onderscheiden.
- Uitbreiding met een moeras-/oeverzone met helofyten, zodat ook de effecten van waterpeil- en inrichtingsvarianten (herstel van moeraszones) op de kwaliteit van meren met het model kunnen worden ingeschat.
- Een aantal kleinere wijzigingen en vereenvoudigingen in diverse modules. Daarnaast zijn er ontwikkelingen denkbaar waarvoor enige uitbreiding van de mogelijkheden van DUFLOW zelf vereist is:
 - In regionale stroomgebiedsstudies op het gebied van eutrofiëring kan het gewenst zijn om verschillende watertypen in een gebied in onderlinge samenhang te beschouwen. Men zou bijvoorbeeld voor de meren in zo'n gebied een ander procesmodel willen hanteren dan voor de kanalen of de sloten, met behoud van de netwerkbenadering. Dit is momenteel in DUFLOW (nog) niet mogelijk: voor alle secties in een netwerk moet hetzelfde procesmodel worden gebruikt.
 - Verder wordt gedacht aan een wat flexibelere definitie van transportprocessen in DUFLOW, zodat hiermee ook migratieprocessen gemodelleerd kunnen worden. Hieronder volgt een wat concretere uitwerking van dit idee.

HET MIGRATIEPROBLEEM VOOR ECOLOGISCHE MODELLEN IN DUFLOW

Een mooie oplossing voor de modellering van ruimtelijke spreiding in ecologische modellen in DUFLOW zou zijn om de gebruiker de mogelijkheid te geven om (net als bij de 'gewone' procesbeschrijving) de verspreidingsprocessen zelf te definiëren. De realisering hier van zal echter niet geheel eenvoudig zijn.

Een andere mogelijkheid lijkt met een beperkte aanpassing van het huidige concept van advectioneel en dispersief transport te realiseren. Hierbij wordt voor iedere toestandsvariabele met een 'advectionefactor' aangegeven in hoeverre advectioneel transport plaats vindt (op een schaal van 0.0–1.0). Met één dispersie-constante per toestandsvariabele (dus niet per se voor alle toestandsvariabelen gelijk) kan voor ieder component apart worden aangegeven hoe snel gradiënten worden afgevlakt. Door beide parameters op nul te zetten worden bottom-variabelen gedefinieerd, en met een advectionefactor van één worden de huidige water-variabelen gedefinieerd. Hierdoor blijven oude modellen ongemoeid.

Door deze parameters zijn er nieuwe mogelijkheden. Zo kan bijvoorbeeld voor grove sedimentdeeltjes worden verondersteld dat ze maar voor 50% advectioneel worden getransporteerd. Vissen kunnen voor 5-10% meestromen, maar met een hoge dispersie kunnen zij zich eenvoudig ook stroomopwaarts verspreiden als daar minder vis voorkomt. Als de advectioneparameter net als nu XT-variabele wordt, dan kunnen bijvoorbeeld wortelende planten voor het grootste deel van het jaar als bottom-variabelen gedefinieerd worden, maar tijdens een deel van het jaar (gedeeltelijk) advectioneel transport plaats vinden, waarmee gesimuleerd kan worden dat zaden en/of afgebroken plantendelen zich met het water mee laten voeren, en elders tot plantengroei kunnen leiden.

Literatuur

- Aalderink, H., 1998. Eutrof2. In: STOWA, DUFLOW: Waterkwaliteit/procesbeschrijvingen.
- Aaldenberg, T. & J.S. Peters, 1990. On relating empirical water quality diagrams and plankton-dynamical models: the SAMPLE methodology applied to a drinking water storage reservoir. *Arch. Hydrobiol. Beih. Ergebn. Limnol.* 33: 893-911.
- Aaldenberg, T., J.H. Janse & P.R.G. Kramer, 1995. Fitting the dynamic lake model PCLake to a multi-lake survey through Bayesian statistics. *Ecol. Mod.* 78: 83-99.
- Ambrose, R.B., T.A. Wool, J.P. Connolly & R.W. Schwanz (1988). WASP4, a hydrodynamic and water quality model - model theory, user's manual and programmer's guide. US EPA, report no EPA/600/3-87/039.
- Aysever, S.S., 1994. Integrated Water Management; A case study for Lake Kortenhoef. The Netherlands. I.H.E., Delft, M.Sc. Thesis E.E. 162.
- Blom, G. & J. Icke, 1996. SLIBMEER, een slibtransportmodel voor ondiepe meren. In: DUFLOW Waterkwaliteit - procesbeschrijvingen. STOWA, report no. 96-22.
- Boers, P.C.M., Van der Does, J., Van der Molen, D.T. & Rip, W., 1993. Eutrophication control in the Netherlands: approach, results, challenges for the future. In: G. Giussani & C. Callieri (eds.), *Proc. 5th Int. Conf. in the Conserv. and Managem. of Lakes, Stresa (Italy)*: 50-53.
- Buyse, J.J., 1988. Water- en stofbalansmodellen voor de Loosdrechtse Plassen. WOL-rapport 1988-7. Instituut voor Aardwetenschappen, Vrije Universiteit, Amsterdam, 87 pp.
- De Haan, H., L. Van Liere, S.J.P. Klapwijk & E. Van Donk, 1993. The structure and function of fen lakes in relation to water table management in The Netherlands. *Hydrobiologia* 265: 155-177.
- Di Toro, D.M., 1976. Combining chemical equilibrium and phytoplankton models - A general methodology. In: R.P. Canale (ed.), *Modeling biochemical processes in aquatic ecosystems*. Ann Arbor Science Publ. Inc., Ann Arbor, Mich.: 233-255.
- Grimm, M.P., 1989. Northern pike (*Esox lucius*) and aquatic vegetation, tools in the management of fisheries and water quality in shallow waters. *Hydrobiol. Bull.* 23: 59-65.
- Gulati, R.D., E.H.R.R. Lammens, M.-L. Meijer & E. Van Donk, eds., 1990a. *Bio-manipulation - tool for water management*. Kluwer Acad. Publ.
- Gulati, R.D., L. van Liere & K. Siewertsen, 1990b. The Loosdrecht lake system: Man's role in its creation, perturbation and rehabilitation. In: O. Ravera (ed.), *Terrestrial and aquatic ecosystems, perturbation and recovery*, pp. 593-606. Ellis Harwood Ltd., Chichester, U.K.
- Hofstra, J.J., J.H. Janse & L. van Liere, 1991. De milieutoestand van de Loosdrechtse Plassen: toepassing van de presentatietechniek AMOEBE en het eutrofiëeringsmodel PCLOOS. *H2O* 24 (10): 260-265.
- Janse, J.H. & T. Aldenberg, 1990a. PCLOOS, a eutrophication model of the Loosdrecht lakes. WQL report no. 1990-1. Report no. 714502001, Nat. Inst. of Public Health and Env. Prot., Bilthoven, 92 pp.
- Janse, J.H. & T. Aldenberg, 1990b. Modelling phosphorus fluxes in the hypertrophic Loosdrecht lakes. *Hydrobiol. Bull.* 24: 69-89.
- Janse, J.H. & T. Aldenberg, 1991. Modelling the eutrophication of the shallow Loosdrecht Lakes. *Verh. int. Ver. Limnol.* 24: 751-757.
- Janse, J.H., T. Aldenberg & P.R.G. Kramer, 1992. A mathematical model of the phosphorus cycle in Lake Loosdrecht and simulation of additional measures. *Hydrobiologia* 233: 119-136.
- Janse, J.H., J. van der Does & J.C. van der Vlugt, 1993. PCLake: Modelling eutrophication and its control measures in Reeuwijk Lakes. In: G. Giussani & C. Callieri (eds.), *Proc. 5th Int. Conf. on the Conserv. and Managem. of Lakes, Stresa (Italy)*: 117-120.
- Janse, J.H., R.D. Gulati & E. Van Donk, 1995. Modelling nutrient cycles in relation to food-web structure in a bio-manipulated shallow lake. *Neth. J. Aquat. Ecol.* 29: 67-79.
- Janse, J.H. & L. van Liere, 1995. PCLake, a modelling tool for the evaluation of lake restoration scenarios. *Wat. Sci. Tech.* 31(8): 371-374.

- Janse, J.H., 1995. Modelling van eutrofiëring en herstelmaatregelen in de Reeuwijkse Plassen. RIVM rapport 732404004.
- Janse, J.H., 1997. A model of nutrient dynamics in shallow lakes in relation to multiple stable states. *Hydrobiologia* 342/343: 1-8.
- Janse, J.H. & P.J.T.M. Van Puijenbroek, 1997. PCDitch, een model voor eutrofiëring en vegetatie-ontwikkeling in sloten. Rapport no. 703715 004, RIVM, Bilthoven.
- Janse, J.H., E. Van Donk & T. Aldenberg, 1998. A model study on the stability of the macrophyte-dominated clear-water state as affected by biological factors. *Water Research*, 32 (9): 2696-2706.
- Jeppesen, E., P. Kristensen, J.P. Jensen, M. Søndergaard, E. Mortensen & T. Lauridsen, 1991. In: G. Giussani, L. Van Liere & B. Moss. Ecosystem research in freshwater environment recovery. *Mem. Ist. ital. Idrobiol.* 48: 127-148.
- Jeuken, M.H.J.L., 1997. De implementatie van het waterkwaliteitsmodel PCLake in DUFLOW. Stageverslag, Landbouwwuniversiteit Wageningen/Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu.
- Moss, B., 1990. Engineering and biological approaches to the restoration from eutrophication of shallow lakes in which aquatic plant communities are important components. *Hydrobiologia*, 200/201: 367-377.
- Riegman, R. & L.R. Mur, 1984. Theoretical considerations on growth kinetics and physiological adaptation of nutrient-limited phytoplankton. *Arch. Microbiol.* 140: 96-100.
- Riegman, R., 1985. Phosphate-phytoplankton interactions. Ph.D. Thesis, University of Amsterdam.
- Ryding, S.O. & C. Forsberg, 1977. Sediments as a nutrient source in shallow polluted lakes. In: H. Golterman (ed.), *Interaction between sediments and fresh water*. Dr. W. Junk, Den Haag: 227-235.
- Sas, H. (ed.), 1989. *Lake restoration by reduction of nutrient loading: expectations, experiences, extrapolations*. Academia-Verlag Richarz, St. Augustin, 497 pp.
- Van Dijk, G.M. and E. Van Donk, 1991. Perspectives for submerged macrophytes in shallow lake restoration projects in The Netherlands. *Hydrobiol. Bull.*, 24: 125-131.
- Van Donk, E., R.D. Gulati, A. Iedema and J. Meulemans, 1993. Macrophyte-related shifts in the nitrogen and phosphorus contents of the different trophic levels in a biomanipulated shallow lake. *Hydrobiologia*, 251: 19-26.
- Van Liere, L. & R.D. Gulati, eds. (1992). *Restoration and recovery of shallow eutrophic lake ecosystems in The Netherlands*. Kluwer Acad. Publ.
- Van Liere, L. & J.H. Janse, 1992. Restoration and resilience to recovery of the Lake Loosdrecht ecosystem in relation to its phosphorus flow. *Hydrobiologia* 233: 95-104.
- Van der Molen, D.T., Portielje, R. & Klapwijk, S.P., 1998. Vierde eutrofiëringsevenquête meren en plassen. *H2O* 31 (11): 16-22.
- Zamurovic-Nenad, Z., 1993. Eutrophication modelling as a management tool for the Vecht lakes. M.Sc. Thesis EE.118, I.H.E., Delft, The Netherlands.


```

// partition coefficients
// -----
PARM kdPadsIMW [ 0.01 ] m3/gDW ;partition coefficients P adsorption
inorganic matter water
PARM kdPadsDetW [ 0.01 ] m3/gDW ;partition coefficients P adsorption
detritus in water
PARM kdPadsIMS [ 0.01 ] m3/gDW ;partition coefficients P adsorption
inorganic matter sediment
PARM kdPadsDetS [ 0.01 ] m3/gDW ;partition coefficients P adsorption
detritus in sediment

// adsorption rate constants
// -----
PARM kSorpPIM [ 0.5 ] 1/day ;P adsorption rate onto inorganic
matter
PARM kSorpPDet [ 0.5 ] 1/day ;P adsorption rate onto detritus

// sedimentation and resuspension parameters
// -----
// shear stress
// -----
PARM cRhoW [ 1000.0 ] kg/m3 ;density of water
PARM cGravAcc [ 9.8 ] m/s2 ;gravitation acceleration
PARM cWindMin [ 0.001 ] m/s ;minimum wind speed

// sedimentation
// -----
PARM cThetaSet [ 1.01 ] 1/(e^oC) ;temperature parameter of sedi-
mentation
PARM cVeloSetIM [ 1.0 ] m/day ;maximum sedimentation velocity
of inorganic matter
PARM cVeloSetDet [ 0.1 ] m/day ;maximum sedimentation velocity
of detritus

// resuspension
// -----
PARM cDepthMinResus [ 0.01 ] m ;minimum sediment depth for
resuspension

// diffusion parameters
// -----
PARM kPD1fPO4 [ 0.000144 ] m2/day ;P diffusion constant
PARM kND1fNO3 [ 0.000172 ] m2/day ;N-NO3 diffusion constant
PARM kND1fNH4 [ 0.000224 ] m2/day ;N-NH4 diffusion constant
// note: set at 2 * molecular diffusion constant, to account for turbu-
lent diffusion
PARM cThetaDif [ 1.02 ] 1/(e^oC) ;temperature coefficient for dif-
fusion
PARM fDepthDif [ 0.5 ] - ;nutrient diffusion distance as
fraction of sediment depth
PARM cDepthDifMin [ 0.001 ] m ;minimum diffusion distance

// chemical loss of PO4 in pore water
// -----
PARM coPO4SMax [ 1.0 ] mgP/l ;maximum SRP concentration in
pore water
PARM kPChemPO4 [ 0.0 ] 1/day ;chemical PO4 loss rate (0.03
(Brill, WL))
// note: set to zero

// algae parameters
// -----
// general parameters
// -----
PARM cTmOptLoss [ 25.0 ] oC ;optimum temperature for grazing
PARM cSigTmLoss [ 13.0 ] oC ;temperature constant of grazing
(sigma in Gaussian curve)
PARM cRelNutExcrPhyt [ 0.5 ] - ;ratio of PExcr to cPDMin for
algae
PARM fDissMortPhyt [ 0.2 ] - ;soluble nutrient fraction of
died Algae
PARM fDissLoss [ 0.25 ] - ;dissolved nutrient fraction of
grazing loss
PARM kResusPhytRef [ 0.25 ] 1/day ;Lake dependent average resus-
pension rate of sediment algae

// DW parameters for diatoms
// -----
PARM cMuMaxDiat [ 2.0 ] 1/day ;maximum growth rate diatoms
PARM cTmOptDiat [ 18.0 ] oC ;optimum temperature diatoms
PARM cSigTmDiat [ 20.0 ] oC ;temperature constant diatoms
(sigma in Gaussian curve)
PARM cExtSpDiat [ 0.25 ] m2/gDW ;specific extinction diatoms
PARM cLOptRefDiat [ 20.0 ] W/m2 ;optimum PAR for diatoms at 20
oC (Steele function)

PARM cChDDiatMin [ 0.004 ] mgChl/mgDW ;minimum chlorophyll/C ratio
diatoms
PARM cChDDiatMax [ 0.012 ] mgChl/mgDW ;maximum chlorophyll/C ratio
diatoms

PARM kDRespDiat [ 0.10 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant diatoms
PARM kLossDiat [ 0.25 ] - ;grazing loss rate for diatoms
PARM kMortDiatW [ 0.01 ] 1/day ;mortality constant of diatoms
in water
PARM kMortDiatS [ 0.03 ] 1/day ;mortality constant of sediment
diatoms

PARM cVeloSetDiat [ 0.35 ] m/day ;sedimentation velocity diatoms

// phosphorus uptake parameters
// -----
PARM cVPUpMaxDiat [ 0.01 ] mgP/mgDW/day;maximum P uptake capacity of
diatoms
PARM cAffPUpDiat [ 0.2 ] 1/mgDW/day ;initial P uptake affinity dia-
toms
PARM cPDiatMin [ 0.0005 ] mgP/mgDW ;minimum P/D ratio diatoms
PARM cPDiatMax [ 0.005 ] mgP/mgDW ;maximum P/D ratio diatoms

// nitrogen uptake parameters

```

```

// -----
PARM cVNUptMaxDiat [ 0.07 ] mgN/mgDW/day;maximum N uptake capacity of
diatoms
PARM cAffNUptDiat [ 0.2 ] 1/mgDW/day ;initial N uptake affinity dia-
toms
PARM cNDiatMin [ 0.01 ] mgN/mgDW ;minimum N/D ratio diatoms
PARM cNDiatMax [ 0.05 ] mgN/mgDW ;maximum N/D ratio diatoms

// silica parameters
// -----
PARM cSiDDiat [ 0.15 ] mgSi/mgDW ;Si/DW ratio diatoms (con-
stant)(Mylius, 1991)
PARM hSiAssDiat [ 0.09 ] mgSi/l ;half-saturating Si concentra-
tion for diatoms growth
// (Pohlmann et al, 1989, zie Mylius '91)

// DW parameters for greens
// -----
PARM cMuMaxGreen [ 1.5 ] 1/day ;maximum growth rate greens
PARM cTmOptGreen [ 25.0 ] oC ;optimum temperature greens
PARM cSigTmGreen [ 15.0 ] oC ;temperature constant greens
(sigma in Gaussian curve)
PARM cExtSpGreen [ 0.25 ] m2/gDW ;specific extinction greens
PARM hLRefGreen [ 16.0 ] W/m2 ;half-saturating PAR for Green
algae at 20 oC (Lehmann function)

PARM cChDGreenMin [ 0.01 ] mgChl/mgDW ;minimum chlorophyll/C ratio
greens
PARM cChDGreenMax [ 0.02 ] mgChl/mgDW ;maximum chlorophyll/C ratio
greens

PARM kDRespGreen [ 0.05 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant greens
PARM kLossGreen [ 0.25 ] - ;grazing loss rate for greens
(if food-web is not included)
PARM kMortGreenW [ 0.01 ] 1/day ;mortality constant of greens in
water
PARM kMortGreenS [ 0.03 ] 1/day ;mortality constant of sediment
greens

PARM cVeloSetGreen [ 0.08 ] m/day ;sedimentation velocity greens

// phosphorus uptake parameters
// -----
PARM cVPUpMaxGreen [ 0.01 ] mgP/mgDW/day;maximum P uptake capacity of
greens
PARM cAffPUpGreen [ 0.2 ] 1/mgDW/day ;initial P uptake affinity greens
PARM cPDGreenMin [ 0.0015 ] mgP/mgDW ;minimum P/D ratio greens
PARM cPDGreenMax [ 0.015 ] mgP/mgDW ;maximum P/D ratio greens

// nitrogen uptake parameters
// -----
PARM cVNUptMaxGreen [ 0.07 ] mgN/mgDW/day;maximum N uptake capacity of
greens
PARM cAffNUptGreen [ 0.2 ] 1/mgDW/day ;initial N uptake affinity greens
PARM cNDGreenMin [ 0.02 ] mgN/mgDW ;minimum N/D ratio greens
PARM cNDGreenMax [ 0.1 ] mgN/mgDW ;maximum N/D ratio greens

// DW parameters for blue-greens
// -----
PARM cMuMaxBlue [ 0.5 ] 1/day ;maximum growth rate blue-greens
PARM cTmOptBlue [ 25.0 ] oC ;optimum temperature blue-greens
PARM cSigTmBlue [ 13.0 ] oC ;temperature constant blue-
greens (sigma in Gaussian curve)
PARM cExtSpBlue [ 0.25 ] m2/gDW ;specific extinction blue-greens
PARM cLOptRefBlue [ 15.0 ] W/m2 ;optimum PAR for blue-greens at
20 oC (Steele function)

PARM cChDBlueMin [ 0.005 ] mgChl/mgDW ;minimum chlorophyll/C ratio
blue-greens
PARM cChDBlueMax [ 0.015 ] mgChl/mgDW ;maximum chlorophyll/C ratio
blue-greens
PARM cCyDBlueMin [ 0.004 ] mgChl/mgDW ;minimum c-phycoocyanin/C ratio
blue-greens
PARM cCyDBlueMax [ 0.06 ] mgChl/mgDW ;maximum c-phycoocyanin/C ratio
blue-greens

PARM kDRespBlue [ 0.036 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant blue-greens
PARM kLossBlue [ 0.03 ] - ;grazing loss rate for blue-
greens (if food-web is not included)
PARM kMortBlueW [ 0.01 ] 1/day ;mortality constant of blue-
greens in water
PARM kMortBlueS [ 0.2 ] 1/day ;mortality constant of sediment
blue-greens

PARM cVeloSetBlue [ 0.02 ] m/day ;sedimentation velocity blue-
greens

// phosphorus uptake parameters
// -----
PARM cVPUpMaxBlue [ 0.04 ] mgP/mgDW/day;maximum P uptake capacity of
blue-greens
PARM cAffPUpBlue [ 0.8 ] 1/mgDW/day ;initial P uptake affinity blue-
greens
PARM cPDBlueMin [ 0.0025 ] mgP/mgDW ;minimum P/D ratio blue-greens
PARM cPDBlueMax [ 0.025 ] mgP/mgDW ;maximum P/D ratio blue-greens

// nitrogen uptake parameters
// -----
PARM cVNUptMaxBlue [ 0.07 ] mgN/mgDW/day;maximum N uptake capacity of
blue-greens
PARM cAffNUptBlue [ 0.2 ] 1/mgDW/day ;initial N uptake affinity blue-
greens
PARM cNDBlueMin [ 0.03 ] mgN/mgDW ;minimum N/D ratio blue-greens
PARM cNDBlueMax [ 0.12 ] mgN/mgDW ;maximum N/D ratio blue-greens

// parameters for mineralisation and (de-)nitrification processes
// -----
// mineralization of water detritus

```

```

// -----
PARM cThetaMinW [ 1.07 ] - ;exponential temperature con-
stant of mineralization in water
PARM kDMinDetW [ 0.025 ] 1/day ;decomposition constant of det-
ritus
PARM kPMinDetW [ 0.025 ] 1/day ;P mineralisation constant of
detritus
PARM kNMinDetW [ 0.025 ] 1/day ;N mineralisation constant of
detritus
PARM kSMinDetW [ 0.002 ] 1/day ;Si mineralisation constant of
detritus

// nitrification
// -----
PARM cThetaNitrW [ 1.08 ] 1/(e^oC) ;temperature parameter of nitrifi-
cation
PARM kNitrNH4W [ 0.05 ] 1/day ;nitrification rate

// mineralization of sediment detritus
// -----
PARM cThetaMinS [ 1.07 ] 1/(e^oC) ;temperature constant of sedi-
ment mineralization
PARM kDMinDetS [ 0.005 ] 1/day ;decomposition constant of sedi-
ment detritus
PARM kPMinDetS [ 0.005 ] 1/day ;P mineralization constant of
sediment detritus
PARM kNMinDetS [ 0.005 ] 1/day ;N mineralization constant of
sediment detritus
PARM kSMinDetS [ 0.002 ] 1/day ;Si mineralisation constant of
sediment detritus

// denitrification
// -----
PARM cThetaDenitS [ 1.05 ] 1/(e^oC) ;temperature parameter of denit-
rification
PARM kDenitNO3S [ 1.0 ] 1/day ;denitrification rate

// food-web parameters
// -----
// herbivorous zooplankton
// -----
PARM cImOptZoo [ 25.0 ] oC ;optimum temperature zooplankton
PARM cSigImZoo [ 13.0 ] oC ;temperature constant zooplank-
ton (sigma in Gaussian curve)
PARM fDAssZoo [ 0.35 ] - ;DW-assimilation efficiency of
herbivorous zooplankton
PARM cFillMax [ 4.0 ] 1/mgDW/day ;maximum filtering rate (when
DOM=0)
PARM hFilt [ 1.0 ] mgDW/l ;half-saturating food concentra-
tion for filtering
PARM cPrefDiat [ 1.0 ] - ;selection factor for diatoms
PARM cPrefGreen [ 1.0 ] - ;selection factor for greens
PARM cPrefBlue [ 0.125 ] - ;selection factor for blue-
greens
PARM cPrefDet [ 0.25 ] - ;selection factor for detritus
PARM fDissEgesZoo [ 0.25 ] - ;soluble nutrient fraction of by
zooplankton egested food
PARM kDRespZoo [ 0.15 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant herbivorous zooplankton
PARM kMortZoo [ 0.04 ] 1/day ;mortality constant herbivorous
zooplankton
PARM fDissMortZoo [ 0.1 ] - ;soluble nutrient fraction of
died zooplankton
PARM cDCarrZoo [ 25.0 ] mgDW/l ;carrying capacity of zooplank-
ton
PARM cPDZooRef [ 0.01 ] mgP/mgDW ;reference P/C-ratio herbivorous
zooplankton
PARM cNDZooRef [ 0.07 ] mgN/mgDW ;reference N/C-ratio herbivorous
zooplankton

// zoobenthos
// -----
PARM cImOptBent [ 25.0 ] oC ;optimum temperature of zoobent-
hos
PARM cSigImBent [ 16.0 ] oC ;temperature constant of
zoobenthos (sigma in Gaussian curve)
PARM fDAssBent [ 0.3 ] - ;C assimilation efficiency of
zoobenthos
PARM kDAssBent [ 0.06 ] 1/day ;maximum assimilation rate
PARM hDFoodBent [ 10.0 ] g/m2 ;half-saturating food for
zoobenthos
PARM fDissEgesBent [ 0.25 ] - ;soluble nutrient fraction of by
zoobenthos egested food
PARM kDRespBent [ 0.02 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant of zoobenthos
PARM kMortBent [ 0.01 ] 1/day ;mortality constant of zoobent-
hos
PARM fDissMortBent [ 0.1 ] - ;soluble P fraction of died
zoobenthos P
PARM cDCarrBent [ 10.0 ] gDW/m2 ;carrying capacity of zoobenthos
(tentative)
PARM cDBentIn [ 0.01 ] gD/m2 ;external zoobenthos density
PARM kMigrBent [ 0.001 ] 1/day ;zoobenthos migration rate
PARM cPDBentRef [ 0.01 ] mgP/mgDW ;reference P/C ratio of zoobent-
hos
PARM cNDBentRef [ 0.07 ] mgN/mgDW ;reference N/C ratio of zoobent-
hos

// general fish constants
// -----
PARM cTimeLagMortFish [ 121.0 ] day ;time lag, used in fish and pisc
portality function

PARM fDBone [ 0.35 ] - ;fraction of fish C fixed in bones
and scales
PARM fPBone [ 0.50 ] - ;fraction of fish P fixed in bones
and scales

// whitefish
// -----
PARM cImOptFish [ 25.0 ] oC ;optimum temperature of whitefish
PARM cSigImFish [ 10.0 ] oC ;temperature constant of white-
fish (sigma in Gaussian curve)
PARM fDAssFish [ 0.4 ] - ;C assimilation efficiency of
whitefish
PARM kDAssFish [ 0.05 ] 1/day ;maximum assimilation rate
PARM hDFoodFish [ 5.0 ] g/m2 ;half-saturating food biomass
for whitefish predation
PARM cPrefZooFish [ 1.0 ] - ;preference factor for feeding
on zooplankton
PARM cPrefBentFish [ 1.0 ] - ;preference factor for feeding
on zoobenthos
PARM cPrefVegFish [ 0.0 ] - ;preference factor for feeding
on vegetation
PARM fDissEgesFish [ 0.25 ] - ;soluble nutrient fraction of by
whitefish egested food
PARM kDRespFish [ 0.004 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant of whitefish
PARM kMortFishMax [ 0.003 ] 1/day ;maximum specific mortality of
whitefish
PARM kMortFishMin [ 0.0005 ] 1/day ;minimum specific mortality of
whitefish
PARM fDissMortFish [ 0.1 ] - ;soluble nutrient fraction of
died whitefish
PARM cDCarrFish [ 10.0 ] gDW/m2 ;carrying capacity of whitefish
(= 100 gFW/m2, Grimm 1983)
PARM cDFishIn [ 0.01 ] gDW/m2 ;external whitefish density
PARM kMigrFish [ 0.001 ] 1/day ;whitefish migration rate
PARM cPDFishRef [ 0.022 ] mgP/mgDW ;reference P/C ratio of whitefish
PARM cNDFishRef [ 0.1 ] mgN/mgDW ;reference N/C ratio of whitefish
PARM kTurbFish [ 2.0 ] g/g fish/day ;relative resuspension by white-
fish browsing

// predatory fish
// -----
PARM cImOptPisc [ 25.0 ] oC ;optimum temperature of predato-
ry fish
PARM cSigImPisc [ 10.0 ] oC ;temperature constant predatory
fish (sigma in Gaussian curve)
PARM fDAssPisc [ 0.4 ] - ;C assimilation efficiency of
predatory fish
PARM kDAssPisc [ 0.02 ] 1/day ;maximum assimilation rate of
predatory fish
PARM hDVegPisc [ 5.0 ] gDW/m2 ;half-saturating vegetation bio-
mass for predatory fish growth
PARM hDFishPisc [ 1.0 ] gDW/m2 ;half-saturating whitefish bio-
mass for predatory fish predation
PARM fDissEgesPisc [ 0.25 ] - ;soluble nutrient fraction of by
fish egested food
PARM kDRespPisc [ 0.005 ] 1/day ;maintenance respiration con-
stant of predatory fish
PARM kMortPiscMax [ 0.003 ] 1/day ;maximum specific mortality of
predatory fish
PARM kMortPiscMin [ 0.0005 ] 1/day ;minimum specific mortality of
predatory fish
PARM fDissMortPisc [ 0.1 ] - ;soluble nutrient fraction of
died predatory fish
PARM cDCarrPisc [ 1.0 ] gDW/m2 ;carrying capacity of predatory
fish (= 10 gFW/m2, Grimm 1983)
PARM cDPiscIn [ 0.001 ] gDW/m2 ;external predatory fish density
PARM kMigrPisc [ 0.001 ] 1/day ;predatory fish migration rate
PARM cPDPiscRef [ 0.022 ] mgP/mgDW ;reference P/C ratio of predato-
ry fish
PARM cNDPiscRef [ 0.1 ] mgN/mgDW ;reference N/C ratio of predato-
ry fish

// vegetation parameters
// -----
PARM cImOptVeg [ 25.0 ] oC ;optimum temperature for vegeta-
tion production
PARM cSigImVeg [ 20.0 ] oC ;temperature constant vegetation
(sigma in Gaussian curve)
PARM cProdMaxVeg [ 10.0 ] mgO2/gDW/h ;maximum production rate of
vegetation at 20oC
PARM hLRefVeg [ 25.0 ] W/m2 PAR ;half-saturating light of vege-
tation at 20 oC
PARM cDWPerO2Veg [ 1.0 ] gDW/gO2 ;conversion factor for vegeta-
tion production
PARM cDGermVegPerm3 [ 0.1 ] gDW/m3 ;biomass of germinating vegeta-
tion per m3
PARM cDGermVeg [ 0.2 ] gDW/m2/day ;germination flux
PARM cTimeGermVeg [ 120.0 ] day ;germination date, each year
PARM kDRespVeg [ 0.036 ] 1/day ;dark respiration rate of vege-
tation
PARM fDetMortVeg [ 0.1 ] - ;fraction of shoot mortality
becoming water detritus
PARM fDissMortVeg [ 0.25 ] - ;fraction dissolved nutrients
from died plants
PARM cDCarrVeg [ 300.0 ] gDW/m2 ;maximum vegetation standing

```



```

CROP
PARM cDVegIn [ 1.0 ] gDW/m2 ;'external vegetation density'
PARM kMigrVeg [ 0.001 ] 1/day ;vegetation migration rate

PARM kVegResus [ 0.02 ] m2/gDW ;relative resuspension reduction
per g vegetation
PARM fRootVeg [ 0.1 ] g-rt/g-veg ;relative root biomass
PARM cExtSpVeg [ 0.01 ] m2/gDW ;specific extinction of vegeta-
tion

PARM cRelNutExcrtVeg [ 0.5 ] - ;ratio of uhPExcrtVeg/uhNDEx-
crtVeg to minimum nutrient ratio
PARM cTimeLagMortVeg [ 45.0 ] 1/day ;switch time for mortality rate
(days after 1. July)
PARM kMortVegMin [ 0.0 ] 1/day ;'summer' mortality rate of
vegetation
PARM kMortVegMax [ 0.02 ] 1/day ;'autumn' mortality rate of
vegetation

// phosphorus uptake parameters
// -----
PARM cVPuptMaxVeg [ 0.01 ] mgP/mgDW/day;maximum P uptake capacity of
vegetation
PARM cAffPuptVeg [ 0.2 ] 1/mgDW/day ;initial P uptake affinity vegeta-
tion
PARM cPDVegRef [ 0.002 ] mgP/mgDW ;P/D ratio of immigrating vegeta-
tion
PARM cPDVegMin [ 0.001 ] mgP/mgDW ;minimum P/D ratio vegetation
PARM cPDVegMax [ 0.0075 ] mgP/mgDW ;maximum P/D ratio vegetation

// nitrogen uptake parameters
// -----
PARM cVNuptMaxVeg [ 0.07 ] mgN/mgDW/day;maximum N uptake capacity of
vegetation
PARM cAffNuptVeg [ 0.2 ] 1/mgD/day ;initial N uptake affinity vegeta-
tion
PARM cNDVegRef [ 0.02 ] mgN/mgDW ;N/D ratio of immigrating vegeta-
tion
PARM cNDVegMin [ 0.01 ] mgN/mgDW ;minimum N/D ratio vegetation
PARM cNDVegMax [ 0.03 ] mgN/mgDW ;maximum N/D ratio vegetation (3
a 4 %)

// constants of herbivorous birds
// -----
PARM cDGrazPerCoot [ 45.0 ] gDW/coot/day;daily grazing of coots
PARM hDVegCoot [ 5.0 ] gDW/m2 ;half-saturating vegetation bio-
mass for coots grazing
PARM fAssCoot [ 0.5 ] - ;coots assimilation efficiency
PARM fDissEgesCoot [ 0.25 ] - ;fraction dissolved nutrient of
coot egestion

// external input variables
// -----
// meteorologic data
// -----
XT mLout [ 100.0 ] W/m2 ;total light
XT fRef [ 0.1 ] - ;fraction of light reflected
XT mTemp [ 12.0 ] oC ;temperature
XT IceCover [ 0 ] 1=yes,0=no ;logical function presence of
ice cover (no = no ice cover)

XT cQInf [ 0.0 ] mm/day ;infiltration rate
// NOTE: cQInf is an XT variable. There is no direct link to the flow module of
DUFLOW (*not possible)
// Therefore infiltration must be modelled in combination with a pure water
'Q add' flow boundary
// condition with no concentrations defined (make sure the condition number
is not used for quality
// boundary conditions! Evaporation must also be modelled as a (negative)
pure water Q add

// local abiotic parameters
// -----
XT fDSed [ 0.2 ] gDW/g sed. ;fraction dry matter sediment
XT cRhoSed [ 1.1 ] ton sed./m3 ;sediment density
XT cTortSed [ 1.17 ] - ;sediment tortuosity
XT cDepthMaxS [ 0.2 ] m ;maximum sediment depth
XT cRoughSed [ 0.001 ] m ;sediment roughness

XT cFunTauSetIM [ 0.5 ] - ;standard shear stress function
for sedimentation of IM
XT cFunTauSetDet [ 0.5 ] - ;standard shear stress function
for sedimentation of detritus

XT cDResusMin [ 0.333 ] g/m2/day ;from WATNAT calibration (0.35)
minimum resuspension flux
XT cFunTauResus [ 12.0 ] - ;standard shear stress function
for resuspension
// note: average resuspension is 12*0.333 = 4 gDW/m2/d

// local algae parameters
// -----
XT cFunTauSetDiat [ 0.7 ] - ;standard shear stress functions
for sedimentation
XT cFunTauSetGreen [ 0.5 ] - ;standard shear stress functions
for sedimentation
XT cFunTauSetBlue [ 0.5 ] - ;standard shear stress functions
for sedimentation

// local foodweb parameters
// -----
XT kHarvFish [ 0.0 ] - ;whitefish harvesting "rate"
XT kHarvPisc [ 0.0 ] - ;predatory fish harvesting "rate"
XT cNrCoots [ 0.0 ] n/ha ;number of coots per ha vegeta-
ted lake (Default = 0)

// diffuse nutrient loadings
// -----
XT cPLoadmg [ 0.0 ] mgP/m2/day ;standard P loading
XT cNLoadmg [ 0.0 ] mgN/m2/day ;standard N loading

XT cPDDetIn [ 0.01 ] mgP/mgDW ;P/D ratio of external detrital

```

```

load
XT cNPRatioLoad [ 7.0 ] gN/gP ;default N/P ratio of detritus
in loading
XT cSiDDetIn [ 0.05 ] gSi/gD ;Si/D ratio of external detrital
load
XT fPO4PLoad [ 0.333 ] - ;soluble fraction of external P-
load
XT fNH4NLoadDiss [ 0.75 ] - ;ammonium fraction of external
dissolved N-load

// flow variables, supplied by DUFLOW
// -----
FLOW Z [ 2.0 ] m ;water depth
FLOW dt [ 86400.0 ] sec ;timestep of DufLOW-quality cal-
culation in seconds

// -----
// *
// * MODEL EQUATIONS
// *
// -----

{
// check for negative state variables
// -----
chkDPhyt = MIN(sDDiatW, sDGreenW, sDBlueW, sDDiatS, sDGreenS, sDBlueS);
// dry weight algae states
chkDWeb = MIN(sDZoo, sDBent, sDFish, sDPisc, sDveg);
// dry weight foodweb/vegetation states
chkDAbio = MIN(sDIMW, sDdetW, sDIMS, sDDetS);
// dry weight abiotic states
chkD = MIN(chkDPhyt, chkDWeb, chkDAbio);
// dry weight states
chkPPhyt = MIN(sPDiatW, sPGreenW, sPBlueW, sPDiatS, sPGreenS, sPBlueS);
// phosphorus algae states
chkPWeb = MIN(sPZoo, sPBent, sPFish, sPPisc, sPveg);
// phosphorus foodweb/vegetation states
chkPAbio = MIN(sPO4W, sPAdsIMW, sPAdsDetW, sPDetW, sPO4S, sPAdsIMS, sPAdsDetS,
sPDetS);
// phosphorus abiotic states
chkP = MIN(chkPPhyt, chkPWeb, chkPAbio);
// phosphorus states
chkNPhyt = MIN(sNDiatW, sNGreenW, sNBlueW, sNDiatS, sNGreenS, sNBlueS);
// nitrogen algae states
chkNWeb = MIN(sNZoo, sNBent, sNFish, sNPisc, sNveg);
// nitrogen foodweb/vegetation states
chkNAbio = MIN(sNIMW, sNHW, sNdetW, sNIMS, sNHWS, sNDetS);
// nitrogen abiotic states
chkN = MIN(chkNPhyt, chkNWeb, chkNAbio);
// nitrogen states
chkSi = MIN(sSiO2W, sSiDetW, sSiDetS);
// silica states

chkTot = MIN(chkD, chkP, chkN, chkSi);
// all states
IF (chkNeg == 1 && chkTot < 0.0)
{
Err = 1.0 / 0.0;
// causes division by zero error for a forced stop
}
// END IF

// initiation of P adsorption
// -----
// equations needed for initiation of P adsorption
// -----
aCorStep = 1.0 / (dt / SecsPerDay);
// used to correct the time-correction due to integration [1/day]
aDTotS = sDIMW + sDdetS;
// total sediment (excluding biota) [g/m2]
aDepthS = aDTotS / cRhoSed / gPerTon / fDSed;
// sediment depth [m]
fPorSed = 1.0 - fDSed;
// sediment porosity [g water/g sediment]
oPO4S = sPO4S / aDepthS / fPorSed;
// actual PO4 concentration in pore water [mgP/l pore water]

// maximum relative P adsorption
// -----
// note: is made dependent on Fe and Al content
uRelPAdsMaxIMW = cRelPAdsDW * cRelPAdsFe * fActFeIMW * fFeDIM + cRelPAdsAl * fAc-
tAlIMW * fAlDIM;
// maximum relative P adsorption onto inorganic matter in water [gP/gDW]
uRelPAdsMaxDetW = cRelPAdsDW + cRelPAdsFe * fActFeDetW * fFeDDet + cRelPAdsAl * fAc-
tAlDetW * fAlDDet;
// maximum relative P adsorption onto detritus in water [gP/gDW]
uRelPAdsMaxIMS = cRelPAdsDW + cRelPAdsFe * fActFeIMS * fFeDIM + cRelPAdsAl * fAc-
tAlIMS * fAlDIM;
// maximum relative P adsorption onto inorganic matter in sediment [gP/gDW]
uRelPAdsMaxDetS = cRelPAdsDW + cRelPAdsFe * fActFeDetS * fFeDDet + cRelPAdsAl * fAc-
tAlDetS * fAlDDet;
// maximum relative P adsorption onto detritus in sediment [gP/gDW]

// initiation of P adsorption
// -----
IF (PAdsInit == 0.0)
{
// initial values for state variables of adsorbed P
// -----
// initial (equilibrium) values of adsorbed P in water
// -----
uRelPAdsIMW = kdPAdsIMW * sPO4W / (1.0 + kdPAdsIMW * sPO4W / uRelPAds-
MaxIMW);
// relative equilibrium P adsorption onto inorganic matter in water
[gP/gDW] (Langmuir isotherm)
oPAdsIMW = uRelPAdsIMW * sDIMW;
// equilibrium concentration of P adsorbed onto inorganic matter in
water [gP/m3]
uRelPAdsDetW = kdPAdsDetW * sPO4W / (1.0 + kdPAdsDetW * sPO4W / uRelPAdsMax-
DetW);
// relative equilibrium P adsorption onto detritus in water [gP/gDW]
}
}

```



```

(Langmuir isotherm)
oPAdsDetW0 = uRelPAdsDetW * sD0etW;
// equilibrium concentration of P adsorbed onto detritus in water
[gP/m3]
// -----
// initial (equilibrium) values of adsorbed P in sediment
uRelPAdsIMS = kdPAdsIMS * oP04S / (1.0 + kdPAdsIMS * oP04S + uRelPAds-
MaxIMS);
// relative equilibrium P adsorption onto inorganic matter in sediment
[gP/gDW] (Langmuir isotherm)
aPAdsIMS0 = uRelPAdsIMS * sDIMS;
// equilibrium amount of P adsorbed onto inorganic matter in sediment
[gP/m2]
uRelPAdsDetS = kdPAdsDetS * oP04S / (1.0 + kdPAdsDetS * oP04S + uRelPAds-
MaxDetS);
// relative equilibrium P adsorption onto detritus in sediment [gP/gDW]
(Langmuir isotherm)
aPAdsDetS0 = uRelPAdsDetS * sD0etS;
// equilibrium amount of P adsorbed onto detritus in sediment [gP/m2]

dPAdsInit = 1.0;
// flag: P adsorption is initialized [-]
}
ELSE
{
oPAdsIMW0 = 0.0; oPAdsDetW0 = 0.0; aPAdsIMS0 = 0.0; aPAdsDetS0 = 0.0; dPAd-
sInit = 0.0;
// set to zero
}
// END IF

oPAdsIMW = sPAdsIMW + oPAdsIMW0;
// actual concentration of P adsorbed onto inorganic matter in water [gP/m3]
oPAdsDetW = sPAdsDetW + oPAdsDetW0;
// actual concentration of P adsorbed onto detritus in water [gP/m3]
aPAdsIMS = sPAdsIMS + aPAdsIMS0;
// actual amount of P adsorbed onto inorganic matter in sediment [gP/m2]
aPAdsDetS = sPAdsDetS + aPAdsDetS0;
// actual amount of P adsorbed onto detritus in sediment [gP/m2]

// input of environmental data
// -----
uDayLeng = cDayLengAve - cDayLengVar * COS(2.0 * Pi * (Time + TenDays) / DaysPer-
Year);
// day length [h/24h]
IF (ReadTmLight == 0)
{
uTm = cTmAve - cTmVar * COS(2.0 * Pi * (Time + TenDays - cTimeLag) / DaysPer-
Year);
// standard water temperature [oC]
uDay = cLDayAve - cLDayVar * COS(2.0 * Pi * (Time + TenDays) / DaysPerYe-
ar);
// total daily radiation [total J/m2/day]
uLOut = uDay / SecsPerDay / uDayLeng;
// average light intensity during daytime [total J/m2/s = W/m2]
}
ELSE
{
uTm = mTemp;
// measured water temperature [oC]
uLOut = mLOut;
// measured average light intensity during daytime [total J/m2/s =
W/m2]
}
// END IF

// hydrological data
// -----
aDepthW = Z;
// water depth [m]
uQInf = cQInf / mmPerm;
// unit conversion of infiltration rate [m/day]

// conversion and summation of concentrations
// -----
// dry weight
// -----
oDPhytW = sDDiatW + sDGreenW + sDBlueW;
// total phytoplankton [mgDW/l]
aDPhytS = sDDiatS + sDGreenS + sDBlueS;
// total sediment phytoplankton [gD/m2]
aDFish = sDFish;
// total whitefish biomass [gD/m2]
aDVeg = sDVeg;
// total vegetation biomass [gDW/m2]
oDOMM = sD0etW + oDPhytW;
// organic seston < 150 mu [mgDW/l]
oDSestW = oDOMM + sDIMM;
// total seston [mgDW/l]

// phosphorus
// -----
oPPhytW = sPDiatW + sPGreenW + sPBlueW;
// total phytoplankton [mgP/l]
aPPhytS = sPDiatS + sPGreenS + sPBlueS;
// total sediment phytoplankton [gP/m2]
aPFish = sPFish;
// total whitefish biomass [gP/m2]
aPVeg = sPVeg;
// total vegetation biomass [gP/m2]
oPInorgW = sP04W + sPAdsDetW + sPAdsIMW;
// inorganic P [mgP/l] (added 21-2-97)
oPOMM = oPPhytW + sP0etW;
// organic seston P, without adsorbed [mgP/l]
oPDMTotW = oPOMM + oPAdsDetW;
// organic seston P including adsorbed [mgP/l]
oPSeStW = oPDMM;
// total seston P, without adsorbed [mgP/l]
oPSeStTotW = oPDMTotW + oPAdsIMW;
// total seston P, including adsorbed [mgP/l]
oPTotW = oPSeStTotW + sP04W;
// total P in water (excluding animals and vegetation) [mgP/l] (added 21-2-

```

```

97)
aPTotS = sPDetS + sP04S + sPAdsDetS + sPAdsIMS + aPPhytS;
// total P in sediment (excluding animals and vegetation) [gP/m2] (added 21-
2-97)
aPSyst = (oPTotW + sPZoo) * aDepthW + aPFish + sPPisc + aPVeg + aPTotS + sPBent;
// total P in system [gP/m2] (added 21-2-97)

// nitrogen
// -----
oNPhytW = sNDiatW + sNGreenW + sNBlueW;
// total phytoplankton [mgN/l]
aNPhytS = sNDiatS + sNGreenS + sNBlueS;
// total sediment phytoplankton [gN/m2]
aNFish = sNFish;
// total whitefish biomass [gN/m2]
aNVec = sNVec;
// total vegetation biomass [gN/m2]
oNDissW = sND03W + sNH4W;
// SRN in water [mgN/l]
oN03S = sN03S / aDepthS / fPorSed;
// actual NO3 concentration in pore water [mgN/l pore water]
oNH4S = sNH4S / aDepthS / fPorSed;
// actual NH4 concentration in pore water [mgN/l pore water]
aNDisS = sNH4S + sN03S;
// total dissolved N in pore water [gN/m2]
oNDissS = aNDissS / aDepthS / fPorSed;
// total actual dissolved N concentration in sediment [mgN/l]
oNOMM = oNPhytW + sN0etW;
// organic seston N [mgN/l]
oNSeStW = oNOMM;
// total seston N [mgN/l]
oNTotW = oNSeStW + oNDissW;
// total N in water (without animals and vegetation) [mgN/l] (added 21-2-97)
aNTotS = sNDetS + aNDissS + aNPhytS;
// total N in sediment [gN/m2] (added 21-2-97)
aN Syst = (oNTotW + sNZoo) * aDepthW + aNFish + sNPisc + aNVec + aNTotS + sNBent;
// total N in system [gN/m2] (added 21-2-97)

// silica
// -----
oSDDiatW = cSDDiat * sDDiatW;
// diatoms [mgSi/l]
aSDDiatS = cSDDiat * sDDiatS;
// diatoms [gSi/m2]
oSPhytW = oSDDiatW;
// Si phytoplankton in water [mgSi/l]
aSiPhytS = aSDDiatS;
// Si phytoplankton on sediment [gSi/m2]

// calculation of nutrient/dry weight ratios
// -----
rPD0etW = sPD0etW / (sD0etW + NoZero);
// P/D ratio of water detritus [gP/gDW]
rPD0etTotW = (sPD0etW + oPAdsDetW) / (sD0etW + NoZero);
// total P/D ratio of water detritus (including adsorbed P) [mgP/mgDW]
rND0etW = sND0etW / (sD0etW + NoZero);
// N/D ratio of water detritus [gN/gDW]
rSDD0etW = sSDD0etW / (sD0etW + NoZero);
// Si/D ratio of water detritus [gSi/gDW]
rPDD0etS = sPDD0etS / (sD0etS + NoZero);
// P content of sediment detritus [gP/gAFDW]
rNDD0etS = sNDD0etS / (sD0etS + NoZero);
// N content of sediment detritus [gN/gAFDW]
rSDD0etS = sSDD0etS / (sD0etS + NoZero);
// Si content of sediment detritus [gSi/gAFDW]

rPDOMM = oPOMM / (oDOMM + NoZero);
// P/C ratio of organic seston, without adsorbed [mgP/mgC]
rPDMTotW = oPDMTotW / (oDOMM + NoZero);
// P/D ratio of organic seston including adsorbed [mgP/mgDW]
rNDOMM = oNDMM / (oDOMM + NoZero);
// N/C ratio of organic seston [mgN/mgC]

rPDSestW = oPSeStW / (oDSeStW + NoZero);
// P/D ratio of total seston, without adsorbed [mgP/mgDW]
rPDSestTotW = oPSeStTotW / (oDSeStW + NoZero);
// P/D ratio of total seston including adsorbed [mgP/mgDW]
rNDSestW = oNSeStW / (oDSeStW + NoZero);
// N/D ratio of total seston [mgN/mgDW]

rPDDiatW = sPDiatW / (sDDiatW + NoZero);
// P/D ratio of diatoms [mgP/mgDW]
rNDDiatW = sNDiatW / (sDDiatW + NoZero);
// N/D ratio of diatoms [mgN/mgDW]
rPDDiatS = sPDiatS / (sDDiatS + NoZero);
// P/D ratio of sediment diatoms [mgP/mgDW]
rNDDiatS = sNDiatS / (sDDiatS + NoZero);
// N/D ratio of sediment diatoms [mgN/mgDW]

rPDGreenW = sPGreenW / (sDGreenW + NoZero);
// P/D ratio of greens [mgP/mgDW]
rNDGreenW = sNGreenW / (sDGreenW + NoZero);
// N/D ratio of greens [mgN/mgDW]
rPDGreenS = sPGreenS / (sDGreenS + NoZero);
// P/D ratio of sediment greens [mgP/mgDW]
rNDGreenS = sNGreenS / (sDGreenS + NoZero);
// N/D ratio of sediment greens [mgN/mgDW]

rPDBlueW = sPBlueW / (sDBlueW + NoZero);
// P/D ratio of blue-greens [mgP/mgDW]
rNDBlueW = sNBlueW / (sDBlueW + NoZero);
// N/D ratio of blue-greens [mgN/mgDW]
rPDBlueS = sPBlueS / (sDBlueS + NoZero);
// P/D ratio of sediment blue-greens [mgP/mgDW]
rNDBlueS = sNBlueS / (sDBlueS + NoZero);
// N/D ratio of sediment blue-greens [mgN/mgDW]

rPDZoo = sPZoo / (sDZoo + NoZero);
// P/D ratio herbivorous zooplankton [mgP/mgDW]
rNZoo = sNZoo / (sDZoo + NoZero);
// N/C ratio herbivorous zooplankton [mgN/mgDW]

rPDBent = sPBent / (sDBent + NoZero);
// P/D ratio of zoobenthos [gP/gD]

```

```

rNBent = sNBent / (sDBent + NoZero);
// N/D ratio of zoobenthos [gN/g]

rPDFish = sPFish / (sDFish + NoZero);
// P/D ratio of fish [gP/gDW]
rNDFish = sNFish / (sDFish + NoZero);
// N/D ratio of fish [gN/g]

rPDPisc = sPPisc / (sDPisc + NoZero);
// P/D ratio of Pisc [gP/g]
rNDPisc = sNPisc / (sDPisc + NoZero);
// N/D ratio of Pisc [gN/g]

rPDVeg = sPVeg / (sDVeg + NoZero);
// P/DW ratio of vegetation [mgP/mgDW]
rNDVeg = sNVeg / (sDVeg + NoZero);
// N/DW ratio of vegetation [mgN/mgDW]

// calculation of extinction and light climate in water
// -----
aExtDet = cExtSpDet * sDDetW;
// detrital contribution to extinction [m-1]
aExtIM = cExtSpIM * sDIMW;
// contribution of inert matter to extinction [m-1]

aExtDiat = cExtSpDiat * sDDiatW;
// extinction by algae [m-1]
aExtGreen = cExtSpGreen * sDGreenW;
// extinction by algae [m-1]
aExtBlue = cExtSpBlue * sDBlueW;
// extinction by algae [m-1]
aExtPhyt = aExtDiat + aExtGreen + aExtBlue;
// phytoplankton contribution to extinction [m-1]

IF (UseVeg == 1)
{
  fShootVeg = 1.0 - fRootVeg;
  // shoot fraction [-]
  aDShootVeg = fShootVeg * sDVeg;
  // shoot biomass [g/m2]
  aExtVeg = cExtSpVeg * sDVeg;
  // contribution of plants to extinction [m-1]
  aHeightVeg = MIN(aDepthW, aDShootVeg / cDGermVegPerm3);
  // height of germinating vegetation (must be less than waterdepth) [m]
}
ELSE
{
  fShootVeg = 0.0; aDShootVeg = 0.0; aExtVeg = 0.0; aHeightVeg = 0.0;
  // set to zero
}
// END IF

aExtCoeff1 = cExtWat + aExtIM + aExtDet + aExtPhyt;
// extinction coefficient, without vegetation [m-1]
aExtCoeff2 = aExtCoeff1 + aExtVeg;
// extinction coefficient including vegetation [m-1]
aExt1Depth = aExtCoeff1 * aDepthW;
// [-]
aExt2Depth = aExtCoeff2 * aDepthW;
// [-]
aExt2Height = aExtCoeff2 * aHeightVeg;
// [-]

uLPAR0 = fPAR * (1.0 - fRef) * uLOut;
// average PAR at zero depth [J/m2/s PAR = W/m2 PAR]
aLPAR1 = uLPAR0 * EXP(- aExtCoeff1 * (aDepthW - aHeightVeg));
// average PAR at top of vegetation [J/m2/s PAR = W/m2 PAR]
aLPARBot = aLPAR1 * EXP(- aExtCoeff2 * aHeightVeg);
// average PAR at bottom [J/m2/s PAR = W/m2 PAR]
aPACoeff = cPACoeffMin + (cPACoeffMax - cPACoeffMin) * hPACoeff / (hPACoeff + oDOMM);
// Poole-Atkins coefficient [-]
aSecchi = MIN(aDepthW, aPACoeff / aExtCoeff1);
// Secchi depth [m]
aDepthEuph = cEuph * aSecchi;
// euphotic depth [m]
aRelDepthEuph = aDepthEuph / aDepthW;
// relative euphotic depth [m]

// P sorption processes (abiotic)
// -----
eqRelPAdsIMM = kdPAdsIMM * sPO4W / (1.0 + kdPAdsIMM * sPO4W / uRelPAdsMaxIMM);
// relative equilibrium P adsorption onto inert organic matter in water [gP/gDW] (Langmuir isotherm)
eqPAdsIMM = eqRelPAdsIMM * sDIMM;
// equilibrium concentration of P adsorbed onto inert organic matter in water [gP/m3]
wSPorpIMM = kSorpPIMM * (eqPAdsIMM - oPAdsIMM);
// P ad-/desorption onto inert organic matter in water [gP/m2/day]

eqRelPAdsDetW = kdPAdsDetW * sPO4W / (1.0 + kdPAdsDetW * sPO4W / uRelPAdsMaxDetW);
// relative equilibrium P adsorption onto detritus in water [gP/gDW] (Langmuir isotherm)
eqPAdsDetW = eqRelPAdsDetW * sDDetW;
// equilibrium concentration of P adsorbed onto detritus in water [gP/m3]
wSPorpDetW = kSorpPDetW * (eqPAdsDetW - oPAdsDetW);
// P ad-/desorption onto detritus in water [gP/m2/day]

// note: sorption in sediment is calculated using Clasens methode for 'fast' processes

// sedimentation and resuspension equations (abiotic)
// -----
// sedimentation
// -----
uFunTmSet = cThetaSet * (uTm - cTmRef);
// temperature correction of sedimentation [-]
uCorVeloSetIM = cFunTauSetIM * uFunTmSet * cVeloSetIM;
// corrected sedimentation velocity of IM [m/day]
tDSetIM = uCorVeloSetIM * sDIMM;
// sedimentation flux of inert matter [g/m2/day]
tPSetAdsIM = oPAdsIMM / sDIMM * tDSetIM;
// sedimentation flux of P adsorbed onto inert organic matter [gP/m2/day]

```

```

// sedimentation of detritus
// -----
uCorVeloSetDet = cFunTauSetDet * uFunTmSet * cVeloSetDet;
// corrected sedimentation velocity of detritus [m/day]
tDSetDet = uCorVeloSetDet * sDDetW;
// sedimentation flux of detritus [g/m2/day]
tPSetAdsDet = oPAdsDetW / sDDetW * tDSetDet;
// sedimentation flux of P adsorbed onto detritus [gP/m2/day]
tPSetDet = uCorVeloSetDet * sPDetW;
// sedimentation flux of detrital P [gP/m2/day]
tNSetDet = uCorVeloSetDet * sNDetW;
// sedimentation flux of detrital N [gN/m2/day]
tSISetDet = uCorVeloSetDet * sSISetW;
// sedimentation flux of detrital Si [gSi/m2/day]

// resuspension
// -----
// effects of vegetation and fish on resuspension
// -----
IF (UseVeg == 1)
  (aFunVegResus = MAX(0.0, 1.0 - kVegResus * aDVeg));
ELSE
  (aFunVegResus = 1.0);
// END IF
// vegetation dependence of resuspension [-]

uFunTmFish = EXP(-0.5/cSigTmFish^2 * ((uTm - cTmOptFish)^2 - (cTmRef - cTmOptFish)^2));
// temperature function of fish [-]

IF (UseWeb == 1)
  (tDTurbFish = kTurbFish * cPrefBentFish * uFunTmFish * sDFish);
ELSE
  (tDTurbFish = 0.0);
// END IF
// bioturbation [g/m2/day]

IF (IceCover == 0 && aDepth > cDepthMinResus)
{
  tDResusPhys = cDResusMin * cFunTauResus * aFunVegResus;
  // physical resuspension flux [g/m2/day]
  tDResusTot = tDResusPhys + tDTurbFish;
  // total resuspension flux [g/m2/day]
}
ELSE
{
  tDResusPhys = 0.0;
  // physical resuspension flux [g/m2/day]
  tDResusTot = 0.0;
  // total resuspension flux [g/m2/day]
}
// END IF

tDResusPhyt = MIN(tDResusTot, kResusPhytRef * aDPhytS);
// resuspension flux of algae [gDW/m2/day]
tDResusDead = tDResusTot - tDResusPhyt;
// total resuspension minus algal resuspension [g/m2/day]
tDResusIM = sDIMM / aDTotS * tDResusDead;
// resuspension flux of inert matter [g/m2/day]
tDResusDet = sDDetS / aDTotS * tDResusDead;
// resuspension flux of detritus [g/m2/day]

tPResusDet = rPDDetS * tDResusDet;
// resuspension flux of detrital P [gP/m2/day]
tPResusPO4 = sPO4S / aDTotS * tDResusDead;
// resuspension flux of dissolved P [gP/m2/day]
tPResusAdsIM = aPAdsIMS / sDIMS * tDResusIM;
// resuspension flux of P adsorbed onto inert matter [gP/m2/day]
tPResusAdsDet = aPAdsDetS / sDDetS * tDResusDet;
// resuspension flux of P adsorbed onto detritus [gP/m2/day]
tPResusTot = tPResusDet + tPResusAdsIM + tPResusAdsDet + tPResusPO4;
// total P resuspension flux [gP/m2/day]

tNResusNO3 = sNO3S / aDTotS * tDResusDead;
// resuspension flux of nitrate [gN/m2/day]
tNResusNH4 = sNH4S / aDTotS * tDResusDead;
// resuspension flux of ammonium [gN/m2/day]
tNResusDet = rNDDetS * tDResusDet;
// resuspension flux of detrital N [gN/m2/day]
tNResusTot = tNResusDet + tNResusNH4 + tNResusNO3;
// total N resuspension flux [gN/m2/day]

tSISusDet = rSIDDetS * tDResusDet;
// resuspension flux of detrital Si [gSi/m2/day]

// infiltration
// -----
// infiltration from water to upper sediment
// -----
tDInfDet = uQInf * sDDetW;
// infiltration of detritus [gD/m2/day]
tDInfIM = uQInf * sDIMM;
// infiltration of inorganic matter [gD/m2/day]

tPInfPO4W = uQInf * sPO4W;
// infiltration of SRP [gP/m2/day]
tPInfDet = uQInf * sPDetW;
// infiltration of detritus [gP/m2/day]
tPInfAdsDet = uQInf * sPAdsDetW;
// infiltration of P adsorbed onto detritus [gP/m2/day]
tPInfAdsIM = uQInf * sPAdsIMM;
// infiltration of P adsorbed onto inorganic matter [gP/m2/day]

tNInfDet = uQInf * sNDetW;
// infiltration of detritus [gN/m2/day]
tNInfNH4 = uQInf * sNH4W;
// infiltration of ammonium [gN/m2/day]
tNInfNO3W = uQInf * sNO3W;
// infiltration of nitrate [gN/m2/day]

tSInfDet = uQInf * sSISetW;

```



```

// infiltration of detritus [gS1/m2/day]
tS1InfS1O2W = uQInf * sS1O2W;
// infiltration of S1O2 [gS1/m2/day]

// infiltration losses from upper sediment to ground water
// -----
// note: is assumed to affect dissolved substances only
// -----
tPInfP04S = uQInf * oP04S;
// infiltration of interstitial P04 [gP/m2/day]
tNInfNH4S = uQInf * oNH4S;
// infiltration of interstitial NH4 [gN/m2/day]
tNInfNO3S = uQInf * oNO3S;
// infiltration of interstitial NO3 [gN/m2/day]

// sediment/water diffusion of dissolved nutrients (abiotic)
// -----
aDepthDif = MAX(cDepthDifMin, fDepthDifS * aDepthS);
// average diffusion distance [m]
uFunTmDif = cThetaDif ^ (uTm - cTmRef);
// temperature function of diffusion [-]
uPorTort2S = fPorSed / (cTortSed ^ 2);
// sediment porosity, corrected for tortuosity [-]
tPDiP04 = kPDiP04 * uFunTmDif * uPorTort2S * (oP04S - sP04W) / aDepthDif;
// diffusion flux of dissolved P from sediment to water [gP/m2/day]
tNDiNO3 = kNDiNO3 * uFunTmDif * uPorTort2S * (oNO3S - sNO3W) / aDepthDif;
// diffusion flux of NO3 from sediment to water [gP/m2/day]
tNDiNH4 = kNDiNH4 * uFunTmDif * uPorTort2S * (oNH4S - sNH4W) / aDepthDif;
// diffusion flux of NH4 from sediment to water [gP/m2/day]

// loss of SRP from pore water by chemical processes (abiotic)
// -----
tPChemP04 = MAX(0.0, kPChemP04 * (oP04S - cP04SMax));
// chemical loss of dissolved P from pore water [gP/m2/day]

// algae processes
// -----
// temperature function of grazing loss
IF (UseWeb == 0)
  (uFunTmLoss = EXP(-0.5 / cSigTmLoss * ((uTm - cTmOptLoss) * 2 - (cTmRef - cTmOptLoss) * 2));)
// temperature function of grazing [-]
ELSE
  (uFunTmLoss = 0.0;)
// END IF

// note: the 'loss'-proces is only used as an alternative for zooplank-
// grazing when the food-web is not used (i.e. Useweb = 0)

// processes diatoms
// -----
// growth of diatoms (=DW assimilation)
// -----
uFunTmDiat = EXP(-0.5 / cSigTmDiat * ((uTm - cTmOptDiat) * 2 - (cTmRef - cTmOptDiat) * 2));
// temperature function of diatoms [-]
uLOptDiat = cLOptRefDiat * uFunTmDiat;
// optimum light for diatoms at current temperature [W/m2]
uMuMaxTmDiat = cMuMaxDiat * uFunTmDiat;
// maximum growth rate of diatoms at ambient temperature [1/day]

aFunAssDiat = EXP(1.0) / aExtDepth * (EXP(-aLPAR1 / uLOptDiat) - EXP(-uLPAR0 / uLOptDiat)) + EXP(1.0) / aExtDepth * (EXP(-aLPARBot / uLOptDiat) - EXP(-aLPAR1 / uLOptDiat));
// Steele light function, diatoms [-]
aFunProdDiat = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cPDDiatMin / rPDDiatW) * cPDDiatMax / (cPDDiatMax - cPDDiatMin)), 0.0);
// Droop function (P) for diatoms [-]
aFunProdDiat = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cNDDiatMin / rNDDiatW) * cNDDiatMax / (cNDDiatMax - cNDDiatMin)), 0.0);
// Droop function (N) for diatoms [-]
aFunSiProdDiat = sSiO2W / (hSiAssDiat + sSiO2W);
// silica dependence of diatoms growth rate [-]
aFunNutProdDiat = MIN(aFunProdDiat, aFunSiProdDiat);
// nutrient limitation function of diatoms [1/day]

aMuDiat = uMuMaxTmDiat * uDayLeng * aFunAssDiat * aFunNutProdDiat;
// growth rate of diatoms [1/day]
wDAssDiat = aMuDiat * sDiatW;
// assimilation diatoms [gDW/m3/day]

// diatoms loss processes (in DW)
// -----
ukDRespTmDiat = kDRespDiat * uFunTmDiat;
// temperature corrected respiration constant of diatoms [1/day]
wDRespDiatW = ukDRespTmDiat * sDiatW;
// respiration of diatoms in water [g/m2/day]
wDMortDiatW = kMortDiatW * sDiatW;
// mortality in water [g/m3/day]
kLossTmDiat = kLossDiat * uFunTmLoss;
// daily grazing on diatoms [1/day]
wDLossDiat = kLossTmDiat * sDiatW;
// diatoms grazing loss [mgDW/1/day]
tDInfDiat = uQInf * sDiatW;
// infiltration of algae [gD/m2/day]

// sedimentation and resuspension of diatoms
// -----
uCorVeloSetDiat = cVeloSetDiat * cFunTauSetDiat * uFunTmSet;
// corrected sedimentation velocity of diatoms [m/day]
tDSetDiat = uCorVeloSetDiat * sDiatW;
// sedimentation flux of diatoms [g/m2/day]
tDResusDiat = sDiatS * aDPPhytS * tDResusPhyt;
// resuspension of diatoms [gD/m2/day]

// total rate of decrease
// -----
kDDecrDiat = ukDRespTmDiat + kLossTmDiat + kMortDiatW + uCorVeloSetDiat / aDepthW;
// total rate of decrease of diatoms in water [1/day]

// total DW flux to diatoms in water
// -----
wDPrinDiatW = wDAssDiat - wDRespDiatW - wDLossDiat - wDMortDiatW + (tDResusDiat - tDSetDiat - tDInfDiat) / aDepthW;
// total DW flux to diatoms in water [mg/1/day]

// phosphorus uptake
// -----
aVPuptMaxCorDiat = MAX(0.0, cVPuptMaxDiat * uFunTmDiat * (cPDDiatMax - rPDDiatW) / (cPDDiatMax - cPDDiatMin));
// maximum P uptake rate of diatoms, corrected for P/D ratio [mgP/mgDW/day]
aVPuptDiat = sP04W * aVPuptMaxCorDiat / (aVPuptMaxCorDiat + cAffVPuptDiat + sP04W);
// P uptake rate of diatoms [mgP/mgDW/day]
wVPuptDiat = aVPuptDiat * sDiatW;
// P uptake diatoms [gP/m3/day]

// P excretion in water
// -----
uHPDDiatExcr = cRelNutExcrPhyt * cPDDiatMin;
// [gP/gDW]
aKPExcrTmDiatW = (rPDDiatW / (uHPDDiatExcr + rPDDiatW)) * ((cPDDiatMax + uHPDDiatExcr) / cPDDiatMax) * ukDRespTmDiat;
// P excretion rate of diatoms [1/day]
wPExcrDiatW = aKPExcrTmDiatW * sDiatW;
// P excretion diatoms in water [gP/m3/day]

// diatoms loss processes in P
// -----
wPMortDiatW = kMortDiatW * sDiatW;
// mortality diatoms in water [gP/m3/day]
wPLossDiat = rPDDiatW * wDLossDiat;
// diatoms grazing loss [mgP/1/day]
tPInfDiat = uQInf * sDiatW;
// infiltration of algae [gP/m2/day]
tPSetDiat = rPDDiatW * tDSetDiat;
// sedimentation [gP/m2/day]
tPResusDiat = rPDDiatS * tDResusDiat;
// resuspension [gP/m2/day]

// total P flux to diatoms in water
// -----
wPPrinDiatW = wVPuptDiat - wPExcrDiatW - wPLossDiat - wPMortDiatW + (tPResusDiat - tPSetDiat - tPInfDiat) / aDepthW;
// total P flux to diatoms in water [mgP/1/day]

// nitrogen uptake
// -----
aVNuptMaxCorDiat = MAX(0.0, cVNuptMaxDiat * uFunTmDiat * (cNDDiatMax - rNDDiatW) / (cNDDiatMax - cNDDiatMin));
// maximum N uptake rate of diatoms, corrected for N/D ratio
aHNuptDiat = aVNuptMaxCorDiat / cAffNuptDiat;
// half-saturating NDissw for uptake by diatoms [mgN/1]
aVNuptDiat = oNDissw * aVNuptMaxCorDiat / (aHNuptDiat + oNDissw);
// N uptake rate of diatoms [mgN/mgDW/day]
wNuptDiat = aVNuptDiat * sDiatW;
// N uptake diatoms [mgN/1/day]
aFNH4UptDiat = sNH4W * sNO3W / ((aHNuptDiat + sNH4W) * (aHNuptDiat + sNO3W)) + sNH4W * aHNuptDiat / ((sNH4W + sNO3W) * (aHNuptDiat + sNO3W));
// fraction ammonium uptake by diatoms [-] (from EPA)
wNuptNH4Diat = aFNH4UptDiat * wNuptDiat;
// ammonium uptake by diatoms [mgN/1/day]
wNuptNO3Diat = wNuptDiat - wNuptNH4Diat;
// nitrate uptake by diatoms [mgN/1/day]

// N excretion
// -----
uHNDDiatExcr = cRelNutExcrPhyt * cNDDiatMin;
// [gN/gDW]
aKNExcrTmDiatW = (rNDDiatW / (uHNDDiatExcr + rNDDiatW)) * ((cNDDiatMax + uHNDDiatExcr) / cNDDiatMax) * ukDRespTmDiat;
// N excretion rate of diatoms [1/day]
wNExcrDiatW = aKNExcrTmDiatW * sDiatW;
// N excretion diatoms in water [gN/m2/day]

// diatoms loss processes in N
// -----
wNMortDiatW = kMortDiatW * sDiatW;
// mortality diatoms in water [gN/m3/day]
wNLossDiat = rNDDiatW * wDLossDiat;
// diatoms grazing loss [mgN/1/day]
tNInfDiat = uQInf * sDiatW;
// infiltration of algae [gN/m2/day]
tNSetDiat = rNDDiatW * tDSetDiat;
// sedimentation [gN/m2/day]
tNResusDiat = rNDDiatS * tDResusDiat;
// resuspension [gN/m2/day]

// total N flux to diatoms in water
// -----
wNPrinDiatW = wNuptDiat - wNExcrDiatW - wNLossDiat - wNMortDiatW + (tNResusDiat - tNSetDiat - tNInfDiat) / aDepthW;
// total N flux to diatoms in water [mgN/1/day]

// chlorophyll content
// -----
rChDiat = cChDiatMax - (cChDiatMax - cChDiatMin) * aFunAssDiat;
// chlorophyll-a/DW ratio diatoms [mg/mg]
oChlDiat = mgPerg * rChDiat * sDiatW;
// chlorophyll-a concentration [mg/m3]
aExtChDiat = cExtSpDiat / rChDiat;
// specific extinction per unit chlorophyll-a [m2/mg chl-a]

// processes of sediment diatoms
// -----
// processes of bottom diatoms in DW
// -----
tDRespDiatS = ukDRespTmDiat * sDiatS;
// respiration of sediment diatoms [gD/m2/day]
tDMortDiatS = kMortDiatS * sDiatS;
// mortality in sediment [g/m2/day]

```



```

// total DW flux to sediment diatoms
//-----
tDPrimDiatS = tDInfDiat + tDSetDiat - tDResusDiat - tDMortDiatS - tDRespDiatS;
// total flux from PRIM module to sediment diatoms [gD/m2/day]

// processes of bottom diatoms in P
//-----
akPExcrTmDiatS = rPDiatS / (uHPDiatExcr + rPDiatS) * (cPDiatMax + uHPDiatExcr) / cPDiatMax * uKDRspTmDiat;
// P excretion rate of diatoms [d-1]
tPExcrDiatS = akPExcrTmDiatS * sPDiatS;
// P excretion of sediment diatoms [gP/m3/day]
tPMortDiatS = kMortDiatS * sPDiatS;
// mortality diatoms [gP/m2/day]

// total P flux to sediment diatoms
//-----
tPPrimDiatS = tPInfDiat + tPSetDiat - tPResusDiat - tPMortDiatS - tPExcrDiatS;
// total flux from PRIM module to sediment diatoms [gP/m2/day]

// processes of bottom diatoms in N
//-----
akNExcrTmDiatS = rNDiatS / (uHNDiatExcr + rNDiatS) * (cNDiatMax + uHNDiatExcr) / cNDiatMax * uKDRspTmDiat;
// N excretion rate of diatoms [d-1]
tNExcrDiatS = akNExcrTmDiatS * sNDiatS;
// N excretion of sediment diatoms [gN/m3/day]
tNMortDiatS = kMortDiatS * sNDiatS;
// mortality diatoms [gN/m2/day]

// total N flux to sediment diatoms
//-----
tNPrimDiatS = tNInfDiat + tNSetDiat - tNResusDiat - tNMortDiatS - tNExcrDiatS;
// total flux in PRIM module to sediment diatoms [gN/m2/day]

// processes greens
//-----
// growth of greens (=DW assimilation)
//-----
uFunTmGreen = EXP(-0.5 / cSigTmGreen^2 * ((uTm - cTmOptGreen)^2 - (cTmRef - cTmOptGreen)^2));
// temperature function of greens [-]
uHGreen = hLRefGreen * uFunTmGreen;
// half-saturating light for greens at current temperature [W/m2]
uMuMaxTmGreen = cMuMaxGreen * uFunTmGreen;
// maximum growth rate of greens at ambient temperature [1/day]

aFunLassGreen = 1.0 / aExtIDepth * LN((1.0 + uLPAR0 / uHGreen) / (1.0 + aLPAR1 / uHGreen)) + 1.0 / aExtZDepth * LN((1.0 + aLPAR1 / uHGreen) / (1.0 + aLPAR0 / uHGreen));
// Lehman light function for greens [-]
aFunProdGreen = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cPDGreenMin / rPDGreenW) * cPDGreenMax / (cPDGreenMax - cPDGreenMin)), 0.0);
// Droop function (P) for greens [-]
aFunNProdGreen = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cNDGreenMin / rNDGreenW) * cNDGreenMax / (cNDGreenMax - cNDGreenMin)), 0.0);
// Droop function (N) for greens [-]
aFunSiProdGreen = 1.0;

aFunNutProdGreen = MIN(aFunProdGreen, aFunNProdGreen, aFunSiProdGreen);
// nutrient limitation function of greens [1/day]

aMuGreen = uMuMaxTmGreen * uDayLeng * aFunLassGreen * aFunNutProdGreen;
// growth rate of greens [1/day]
wDAssGreen = aMuGreen * sDGreenW;
// assimilation greens [gDW/m3/day]

// phytoplankton loss processes (in DW)
//-----
uKDRspTmGreen = kDRspGreen * uFunTmGreen;
// temperature corrected respiration constant of greens [1/day]
wDRspGreenW = uKDRspTmGreen * sDGreenW;
// respiration of greens in water [g/m2/day]
wDMortGreenW = kMortGreenW * sDGreenW;
// mortality in water [g/m3/day]
kLossTmGreen = kLossGreen * uFunTmLoss;
// daily grazing on greens [1/day]
wDLossGreen = kLossTmGreen * sDGreenW;
// greens grazing loss [mgDW/l/day]
tDInfGreen = uQInf * sDGreenW;
// infiltration of algae [gD/m2/day]

// sedimentation and resuspension of greens
//-----
uCorVeloSetGreen = cVeloSetGreen * cFunTauSetGreen * uFunTmSet;
// corrected sedimentation velocity of greens [m/day]
tDSetGreen = uCorVeloSetGreen * sDGreenW;
// sedimentation flux of greens [g/m2/day]
tDResusGreen = sDGreenS / aDPhytS * tDResusPhyt;
// resuspension of greens [gD/m2/day]

// total rate of decrease
//-----
kDDecrGreen = uKDRspTmGreen + kLossTmGreen + kMortGreenW + uCorVeloSetGreen / aDepthW;
// total rate of decrease of greens in water [1/day]

// total DW flux to greens in water
//-----
wDPrimGreenW = wDAssGreen - wDRspGreenW - wDLossGreen - wDMortGreenW + (tDResusGreen - tDSetGreen - tDInfGreen) / aDepthW;
// total DW flux to greens in water [mg/l/day]

// phosphorus uptake
//-----
aVPuptMaxCorGreen = MAX(0.0, cVPuptMaxGreen * uFunTmGreen * (cPDGreenMax - rPDGreenW) / (cPDGreenMax - cPDGreenMin));
// maximum P uptake rate of greens, corrected for P/D ratio
aVPuptGreen = sPD4W * aVPuptMaxCorGreen / (aVPuptMaxCorGreen / cAffVPuptGreen + sPD4W);
// P uptake rate of greens [mgP/mgDW/day]
wPUptGreen = aVPuptGreen * sDGreenW;
// P uptake greens [gP/m2/day]

```

```

// P excretion in water
//-----
uHPDGGreenExcr = cReINutExcrPhyt * cPDGreenMin;
// [gP/gDW]
akPExcrTmGreenW = (rPDGreenW / (uHPDGGreenExcr + rPDGreenW)) * ((cPDGreenMax + uHPDGGreenExcr) / cPDGreenMax * uKDRspTmGreen);
// P excretion rate of greens [1/day]
wPExcrGreenW = akPExcrTmGreenW * sPGreenW;
// P excretion greens in water [gP/m3/day]

// phytoplankton loss processes in P
//-----
wPMortGreenW = kMortGreenW * sPGreenW;
// mortality greens in water [gP/m3/day]
wPLossGreen = rPDGreenW * wDLossGreen;
// greens grazing loss [mgP/l/day]
tPInfGreen = uQInf * sPGreenW;
// infiltration of algae [gP/m2/day]
tPSetGreen = rPDGreenW * tDSetGreen;
// sedimentation [gP/m2/day]
tPResusGreen = rPDGreenS * tDResusGreen;
// resuspension [gP/m2/day]

// total P flux to greens in water
//-----
wPPrimGreenW = wPUptGreen - wPExcrGreenW - wPLossGreen - wPMortGreenW + (tPResusGreen - tPSetGreen - tPInfGreen) / aDepthW;
// total P flux to greens in water [mgP/l/day]

// nitrogen uptake
//-----
aVNuptMaxCorGreen = MAX(0.0, cVNuptMaxGreen * uFunTmGreen * (cNDGreenMax - rNDGreenW) / (cNDGreenMax - cNDGreenMin));
// maximum N uptake rate of greens, corrected for N/D ratio
aHNuptGreen = aVNuptMaxCorGreen / cAffNuptGreen;
// half-saturating NDissW for uptake by greens [mgN/l]
aVNuptGreen = cNDissW * aVNuptMaxCorGreen / (aHNuptGreen + cNDissW);
// N uptake rate of greens [mgN/mgDW/day]
wNUptGreen = aVNuptGreen * sDGreenW;
// N uptake greens [mgN/l/day]
aFNH4UptGreen = sNH4W * sNO3W / ((aHNuptGreen + sNH4W) * (aHNuptGreen + sNO3W)) + sNH4W * aHNuptGreen / ((sNH4W + sNO3W) * (aHNuptGreen + sNO3W));
// fraction ammonium uptake by greens [-] (from EPA)
wNUptNH4Green = aFNH4UptGreen * wNUptGreen;
// ammonium uptake by greens [mgN/l/day]
wNUptNO3Green = wNUptGreen - wNUptNH4Green;
// nitrate uptake by greens [mgN/l/day]

// N excretion
//-----
uHNDGreenExcr = cReINutExcrPhyt * cNDGreenMin;
// [gN/gDW]
akNExcrTmGreenW = (rNDGreenW / (uHNDGreenExcr + rNDGreenW)) * ((cNDGreenMax + uHNDGreenExcr) / cNDGreenMax * uKDRspTmGreen);
// N excretion rate of greens [1/day]
wNExcrGreenW = akNExcrTmGreenW * sNGreenW;
// N excretion greens in water [gN/m2/day]

// phytoplankton loss processes in N
//-----
wNMortGreenW = kMortGreenW * sNGreenW;
// mortality greens in water [gN/m3/day]
wNLossGreen = rNDGreenW * wDLossGreen;
// greens grazing loss [mgN/l/day]
tNInfGreen = uQInf * sNGreenW;
// infiltration of algae [gN/m2/day]
tNSetGreen = rNDGreenW * tDSetGreen;
// sedimentation [gN/m2/day]
tNResusGreen = rNDGreenS * tDResusGreen;
// resuspension [gN/m2/day]

// total N flux to greens in water
//-----
wNPrimGreenW = wNUptGreen - wNExcrGreenW - wNLossGreen - wNMortGreenW + (tNResusGreen - tNSetGreen - tNInfGreen) / aDepthW;
// total N flux to greens in water [mgN/l/day]

// chlorophyll content
//-----
rChDGreen = cChDGreenMax - (cChDGreenMax - cChDGreenMin) * aFunLassGreen;
// chlorophyll-a/DW ratio greens [mg/mg]
cChlAgreen = mgPerg * rChDGreen * sDGreenW;
// chlorophyll-a concentration [mg/m3]
aExtChGreen = cExtSpGreen / rChDGreen;
// specific extinction per unit chlorophyll-a [m2/mg chl-a]

// processes of sediment greens
//-----
// processes of bottom greens in DW
//-----
tDRspGreenS = uKDRspTmGreen * sDGreenS;
// respiration of sediment greens [gD/m2/day]
tDMortGreenS = kMortGreenS * sDGreenS;
// mortality in sediment [g/m2/day]

// total DW flux to sediment greens
//-----
tDPrimGreenS = tDInfGreen + tDSetGreen - tDResusGreen - tDMortGreenS - tDRspGreenS;
// total flux from PRIM module to sediment greens [gD/m2/day]

// processes of bottom greens in P
//-----
akPExcrTmGreenS = rPDGreenS / (uHPDGGreenExcr + rPDGreenS) * (cPDGreenMax + uHPDGGreenExcr) / cPDGreenMax * uKDRspTmGreen;
// P excretion rate of greens [d-1]
tPExcrGreenS = akPExcrTmGreenS * sPGreenS;
// P excretion of sediment greens [gP/m3/day]
tPMortGreenS = kMortGreenS * sPGreenS;
// mortality greens [gP/m2/day]

// total P flux to sediment greens

```



```

// -----
tPPrimGreenS = tPInGreen + tPSetGreen - tPResusGreen - tPMortGreenS - tPExcrGreenS;
// total flux from PRIM module to sediment greens [gP/m2/day]

// processes of bottom greens in N
// -----
akNExcrTmGreenS = rNDGreenS / (uHNDGreenExcr + rNDGreenS) * (cNDGreenMax + uHNDGreenExcr) / cNDGreenMax * uKDRRespTmGreen;
// N excretion rate of greens [d-1]
tNExcrGreenS = akNExcrTmGreenS * sNGreenS;
// N excretion of sediment greens [gN/m3/day]
tNMortGreenS = kMortGreenS * sNGreenS;
// mortality greens [gN/m2/day]

// total N flux to sediment greens
// -----
tNPrimGreenS = tNInGreen + tNSetGreen - tNResusGreen - tNMortGreenS - tNExcrGreenS;
// total flux in PRIM module to sediment greens [gN/m2/day]

// processes blue-greens
// -----
// growth of phytoplankton [+DW assimilation]
// -----
uFunTmBlue = EXP(-0.5 / cSigtMBlue^2 * ((uTm - cTmOptBlue)^2 - (cTmRef - cTmOptBlue)^2));
// temperature function of blue-greens [-]
uLOptBlue = cLOptRefBlue * uFunTmBlue;
// optimum light for blue-greens at current temperature [W/m2]
uMumaxTmBlue = cMumaxBlue * uFunTmBlue;
// maximum growth rate of blue-greens at ambient temperature [1/day]

aFunAssBlue = EXP(1.0) / aExtDepth * (EXP(- aLPAR1 / uLOptBlue) - EXP(- uLPARD / uLOptBlue)) + EXP(1.0) / aExt2Depth * (EXP(- aLPARBot / uLOptBlue) - EXP(- aLPAR1 / uLOptBlue));
// Steele light function, blue-greens [-]
aFunPProdBlue = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cPDBlueMin / rPDBlueW) * cPDBlueMax / (cPDBlueMax - cPDBlueMin)), 0.0);
// Droop function (P) for blue-greens [-]
aFunNProdBlue = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cNDBlueMin / rNDBlueW) * cNDBlueMax / (cNDBlueMax - cNDBlueMin)), 0.0);
// Droop function (N) for blue-greens [-]
aFunSProdBlue = 1.0;

aFunNutProdBlue = MIN(aFunPProdBlue, aFunNProdBlue, aFunSProdBlue);
// nutrient limitation function of blue-greens [1/day]

aMuBlue = uMumaxTmBlue * uDayLeng * aFunAssBlue * aFunNutProdBlue;
// growth rate of blue-greens [1/day]
wDAssBlue = aMuBlue * sDBlueW;
// assimilation blue-greens [gDW/m3/day]

// phytoplankton loss processes (in DW)
// -----
uKDRRespTmBlue = kDRRespBlue * uFunTmBlue;
// temperature corrected respiration constant of blue-greens [1/day]
wDRRespBlue = uKDRRespTmBlue * sDBlueW;
// respiration of blue-greens in water [g/m2/day]
wDMortBlue = kMortBlue * sDBlueW;
// mortality in water [g/m3/day]
kLossTmBlue = kLossBlue * uFunTmLoss;
// daily grazing on blue-greens [1/day]
wDLossBlue = kLossTmBlue * sDBlueW;
// blue-greens grazing loss [gDW/1/day]
tDInfBlue = uQInf * sDBlueW;
// infiltration of algae [gD/m2/day]

// sedimentation and resuspension of blue-greens
// -----
uCorVeloSetBlue = cVeloSetBlue * cFunTausetBlue * uFunTmSet;
// corrected sedimentation velocity of blue-greens [m/day]
tDSetBlue = uCorVeloSetBlue * sDBlueW;
// sedimentation flux of blue-greens [g/m2/day]
tDResusBlue = sDBlueS / aDPhytS * tDResusPhyt;
// resuspension of blue-greens [gD/m2/day]

// total rate of decrease
// -----
kDDecrBlue = uKDRRespTmBlue + kLossTmBlue + kMortBlueW + uCorVeloSetBlue / aDepthW;
// total rate of decrease of blue-greens in water [1/day]

// total DW flux to blue-greens in water
// -----
wDPrimBlueW = wDAssBlue - wDRRespBlueW - wDLossBlue - wDMortBlueW + (tDResusBlue - tDSetBlue - tDInfBlue) / aDepthW;
// total DW flux to blue-greens in water [mg/1/day]

// phosphorus uptake
// -----
aVPuptMaxCorBlue = MAX(0.0, cVPuptMaxBlue * uFunTmBlue * (cPDBlueMax - rPDBlueW) / (cPDBlueMax - cPDBlueMin));
// maximum P uptake rate of blue-greens, corrected for P/D ratio
aVPuptBlue = sP04W * aVPuptMaxCorBlue / (aVPuptMaxCorBlue / cAffVPuptBlue + sP04W);
// P uptake rate of blue-greens [mgP/mgDW/day]
wPUptBlue = aVPuptBlue * sDBlueW;
// P uptake blue-greens [gP/m2/day]

// P excretion in water
// -----
uHPOblueExcr = cRelNutExcrPhyt * cPOblueMin;
// [gP/gDW]
akPExcrTmBlueW = (rPDBlueW / (uHPOblueExcr + rPDBlueW)) * ((cPOblueMax + uHPOblueExcr) / cPDBlueMax) * uKDRRespTmBlue;
// P excretion rate of blue-greens [d-1]
tPExcrBlueS = akPExcrTmBlueS * sPBlueS;
// P excretion of sediment blue-greens [gP/m3/day]
tPMortBlueS = kMortBlueS * sPBlueS;
// mortality blue-greens [gP/m2/day]

// total P flux to sediment blue-greens
// -----
tPPrimBlueS = tPInBlue + tPSetBlue - tPResusBlue - tPMortBlueS - tPExcrBlueS;
// total flux in PRIM module to sediment blue-greens [gP/m2/day]

// processes of bottom blue-greens in P
// -----
akPExcrTmBlueS = rPDBlueS / (uHPOblueExcr + rPDBlueS) * (cPOblueMax + uHPOblueExcr) / cPDBlueMax * uKDRRespTmBlue;
// P excretion rate of blue-greens [d-1]
tNExcrBlueS = akPExcrTmBlueS * sNBlueS;
// N excretion of sediment blue-greens [gN/m3/day]
tNMortBlueS = kMortBlueS * sNBlueS;
// mortality blue-greens [gN/m2/day]

// total N flux to sediment blue-greens
// -----

```



```

// Si fluxes
// -----
wSiPrimSiO2W = wSiMinDetW + tSiMinDetS / aDepthW + wSiExcrDiatW - wSiUptDiat +
tSiExcrDiatS / aDepthW;
// dissolved silica in water [gSi/l/day]
wSiPrimDetW = - wSiMinDetW + wSiMortDiatW + wSiLossDiat;
// detritus in water [mgSi/l/day]
tSiPrimDetS = - tSiMinDetS + tSiMortDiatS;
// detritus in sediment [gSi/m2/day]

// mass-balance check
// -----
IDPrimIn = (wDAssPhyt - wDRespPhyt) * aDepthW - wDMinDetW * aDepthW - tDMinDetS;
// total DW flux in PRIM module into the system [gDW/m2/day]
tNPrimIn = - tNDenitNO3S;
// total N flux in PRIM module into the system [gN/m2/day]

// extra output variables
// -----
// nutrient uptake 'rates'
kPuptDiat = wPuptDiat / sPDiatW;
// P uptake 'rate' diatoms [MJ] [1/day]
kPuptGreen = wPuptGreen / sPGreenW;
// P uptake 'rate' greens [MJ] [1/day]
kPuptBlue = wPuptBlue / sPBlueW;
// P uptake 'rate' blue-greens [MJ] [1/day]
kNuptDiat = wNuptDiat / sNDiatW;
// N uptake 'rate' diatoms [MJ] [1/day]
kNuptGreen = wNuptGreen / sNGreenW;
// N uptake 'rate' greens [MJ] [1/day]
kNuptBlue = wNuptBlue / sNBlueW;
// N uptake 'rate' blue-greens [MJ] [1/day]

// chlorophyll extinction
// -----
oChla = oChlaDiat + oChlaGreen + oChlaBlue;
// total chlorophyll-a [mg/m3]
aChlaH = oChla * aDepthW;
// standing crop [mg chlorophyll-a/m2]
rChDOMW = oChla / oDOMW;
// chlorophyll-a to DW ratio of organic seston <150 mu [mgChla/mgDW]
aExtChPhyt = aExtPhyt / (oChla / mgPerg);
// average specific extinction of algae per unit chl-a [m2/g chl-a]
aExtChTot = aExtCoef1 / oChla;
// total extinction (excluding vegetation) per unit chl-a [m2/mg chl-a]
rCyDBLue = cCyDBLueMax - (cCyDBLueMax - cCyDBLueMin) * aFunLAssBlue;
// C-pheococyanin/DW-ratio blue-greens [mg/mg]
oCyan = rCyDBLue * sDBLueW * mgPerg;
// C-pheococyanin [mg/m3]
rPChSestA = oPOMW / oChla;
// P/chlorophyll ratio of organic seston [mgP/mgChla]
wNuptPhyt = wNuptH4Phyt + wNuptNO3Phyt;
// total N uptake by algae [mgN/l/day]
rNChSestA = oNOMW / oChla;
// N/chlorophyll ratio of organic seston [mgN/mgChla]

// food-web processes
// -----
// processes of herbivorous zooplankton
uFunTmZoo = EXP(-0.5/cSigTmZoo^2 * ((uTm-cTmOptZoo)^2 - (cTmRef - cTmOptZoo)^2));
// temperature function of zooplankton [-]

// environmental correction
// -----
ukDAssTmZoo = fDAssZoo * cFiltMax * uFunTmZoo * hFilt;
// maximum assimilation rate of zooplankton, temperature corrected [1/day]
ukDRespTmZoo = kDRespZoo * uFunTmZoo;
// respiration constant of zooplankton [1/day]
ukDIncrZoo = ukDAssTmZoo - ukDRespTmZoo - wMortZoo;
// intrinsic rate of increase of zooplankton [1/day]
wDEnvZoo = MAX(0.0, ukDIncrZoo / cDCarZoo * sDZoo^2);
// environmental correction of zooplankton [mg/l/day]

// assimilation
// -----
oDFoodZoo = cPrefDiat * sDiatW + cPrefGreen * sDGreenW + cPrefBlue * sDBLueW +
cPrefDet * sDDetW;
// food for zooplankton [mgD/l]
aSatDZoo = oDFoodZoo / (hFilt + oDOMW);
// food saturation function of zooplankton [-]
wDAssZoo = aSatDZoo * (ukDAssTmZoo * sDZoo - wDEnvZoo);
// assimilation of zooplankton [mg/l/day]

// grazing
// -----
wDConsZoo = wDAssZoo / fDAssZoo;
// consumption of zooplankton [mg/l/day]
wDConsDetZoo = cPrefDet*sDDetW / oDFoodZoo * wDConsZoo;
// detritus consumption by zooplankton [mg/l/day]
wDConsDiatZoo = cPrefDiat*sDiatW / oDFoodZoo * wDConsZoo;
// diatoms consumption by zooplankton [mg/l/day]
wDConsGreenZoo = cPrefGreen*sDGreenW / oDFoodZoo * wDConsZoo;
// greens consumption by zooplankton [mg/l/day]
wDConsBlueZoo = cPrefBlue*sDBLueW / oDFoodZoo * wDConsZoo;
// blue-greens consumption by zooplankton [mg/l/day]
wDConsPhytZoo = wDConsDiatZoo + wDConsGreenZoo + wDConsBlueZoo;
// phytoplankton consumption by zooplankton [mg/l/day]
wDEgesZoo = wDConsZoo - wDAssZoo;
// egestion of zooplankton [mg/l/day]

// loss processes in DW
// -----
aCorDRespZoo = MAX(cPDZooRef / rPDZoo, cNDZooRef / rNDZoo);
// correction factor of zooplankton respiration for P and N content [-]
wDRespZoo = aCorDRespZoo * ukDRespTmZoo * sDZoo;
// zooplankton respiration [mg/l/day]
wDMortZoo = wMortZoo * sDZoo + (1.0 - aSatDZoo) * wDEnvZoo;
// zooplankton mortality, including environmental correction [mg/l/day]

```

```

// processes of herbivorous zooplankton, in P
// -----
// grazing
// -----
oPFood = cPrefDiat*sPDiatW + cPrefGreen*sPGreenW + cPrefBlue*sPBlueW + cPrefDet *
(sPDetW + sPAdsDetW);
// zooplankton food [mgP/l]
rPFood = oPFood / (oDFoodZoo + NoZero);
// P/D ratio of zooplankton food [mgP/mgDW]

wPConsDiatZoo = rPDiatW * wDConsDiatZoo;
// consumption [mgP/l/day]
wPConsGreenZoo = rPGreenW * wDConsGreenZoo;
// consumption [mgP/l/day]
wPConsBlueZoo = rPBlueW * wDConsBlueZoo;
// consumption [mgP/l/day]
wPConsPhytZoo = wPConsDiatZoo + wPConsGreenZoo + wPConsBlueZoo;
// total phytoplankton consumption by zooplankton [mgP/l/day]
wPConsDetZoo = rPDetW * wDConsDetZoo;
// consumption of detrital P [mgP/l/day]
wPConsAdsDetZoo = sPAdsDetW*sDDetW * wDConsDetZoo;
// consumption of adsorbed P [mgP/l/day]
wPConsZoo = wPConsPhytZoo + wPConsDetZoo + wPConsAdsDetZoo;
// total P consumption [mgP/l/day]

// assimilation and egestion
// -----
aFAssZoo = MIN(1.0, cPDZooRef / rPFood * fDAssZoo);
// P assimilation efficiency of herbivores [-]
wPAssZoo = aFAssZoo*wPConsZoo;
// assimilation by herbivores [mgP/l/day]
wPEgesZoo = wPConsZoo - wPAssZoo;
// P egestion [mgP/l/day]
wPEgesZooP04 = fDissEgesZoo*wPEgesZoo;
// soluble P egestion [mgP/l/day]
wPEgesZooDet = wPEgesZoo - wPEgesZooP04;
// detrital P egestion [mgP/l/day]

// loss processes in P
// -----
aKPEXcrZoo = rPDZoo / cPDZooRef * kDRespZoo;
// P excretion rate of herbivores [1/day]
wPEXcrZoo = aKPEXcrZoo*sPZoo;
// P excretion [mgP/l/day]
wPMortZoo = rPDZoo * wMortZoo;
// mortality [mgP/l/day]
wPMortZooP04 = fDissMortZoo * wPMortZoo;
// soluble P mortality [mgP/l/day]
wPMortZooDet = wPMortZoo - wPMortZooP04;
// detrital P mortality [mgP/l/day]

// processes of herbivorous zooplankton, in N
// -----
// grazing
// -----
oNFood = cPrefDiat*sNDiatW + cPrefGreen*sNGreenW + cPrefBlue*sNBlueW +
cPrefDet*sNDetW;
// zooplankton food [mgN/l]
rNFood = oNFood / (oDFoodZoo + NoZero);
// N/C ratio of zooplankton food [mgN/mgDW]

wNConsDiatZoo = rNDiatW*wDConsDiatZoo;
// consumption [mgN/l/day]
wNConsGreenZoo = rNDGreenW*wDConsGreenZoo;
// consumption [mgN/l/day]
wNConsBlueZoo = rNDBLueW*wDConsBlueZoo;
// consumption [mgN/l/day]
wNConsPhytZoo = wNConsDiatZoo + wNConsGreenZoo + wNConsBlueZoo;
// total phytoplankton consumption by zooplankton [mgN/l/day]
wNConsDetZoo = rNDDetW*wDConsDetZoo;
// consumption of detrital N [mgN/l/day]
wNConsZoo = wNConsPhytZoo + wNConsDetZoo;
// total N consumption [mgN/l/day]

// assimilation and egestion
// -----
aFAssZoo = MIN(1.0, cNDZooRef / rNDFood * fDAssZoo);
// N assimilation efficiency of herbivores [-]
wNAssZoo = aFAssZoo*wNConsZoo;
// assimilation by herbivores [mgN/l/day]
wNEgesZoo = wNConsZoo - wNAssZoo;
// N egestion [mgN/l/day]
wNEgesZooN04 = fDissEgesZoo*wNEgesZoo;
// soluble N egestion [mgN/l/day]
wNEgesZooDet = wNEgesZoo - wNEgesZooN04;
// detrital N egestion [mgN/l/day]

// loss processes in N
// -----
aKNEXcrZoo = rNDZoo / cNDZooRef * kDRespZoo;
// N excretion rate of herbivores [1/day]
wNEXcrZoo = aKNEXcrZoo*sNZoo;
// N excretion [mgN/l/day]
wNMortZoo = rNDZoo*wMortZoo;
// mortality [mgN/l/day]
wNMortZooN04 = fDissMortZoo*wNMortZoo;
// soluble N mortality [mgN/l/day]
wNMortZooDet = wNMortZoo - wNMortZooN04;
// detrital N mortality [mgN/l/day]

// zooplankton processes in Si
// -----
wSiConsDetZoo = rSiDDetW * wDConsDetZoo;
// consumption of detritus [mgSi/l/day]
wSiConsDiatZoo = cSiDDiat * wDConsDiatZoo;
// consumption of diatoms [mgSi/l/day]
wSiEgesZoo = wSiConsDetZoo + wSiConsDiatZoo;
// egestion of silica by zooplankton [mgSi/l/day]
// note: all silica consumed is assumed being egested, as detrital Si

// zoobenthos processes

```

```

// -----
uFunTmBent = EXP(-0.5/cSigTmBent*2 * ((uTm-cTmOptBent)^2 - (cTmRef-cTmOptBent)^2));
// temperature function of zoobenthos [-]

// environmental correction
// -----
ukDAssTmBent = uFunTmBent * kDAssBent;
// assimilation rate of zoobenthos [1/day]
ukDRespTmBent = uFunTmBent * kDRespBent;
// respiration rate of zoobenthos [1/day]
ukDIncrBent = ukDAssTmBent - ukDRespTmBent - kMortBent;
// intrinsic net increase rate of zoobenthos [1/day]
tDEnvBent = MAX(0.0, ukDIncrBent / cDCarrBent * sDBent^2);
// environmental correction of zoobenthos [gD/m2/day]

// assimilation
// -----
aDFoodBent = sDDetS + aDPhytS;
// food for zoobenthos [gD/m2]
aSatDBent = aDFoodBent / (hDFoodBent + aDFoodBent);
// food limitation function of zoobenthos [-]
tDAssBent = aSatDBent * (ukDAssTmBent * sDBent - tDEnvBent);
// assimilation of zoobenthos [gD/m2/day]
aDAssBentSp = tDAssBent / sDBent;
// specific assimilation rate of zoobenthos [1/day]

// grazing
// -----
tDConsBent = tDAssBent / fDAssBent;
// consumption of zoobenthos [gD/m2/day]
tDConsDetBent = sDDetS / aDFoodBent * tDConsBent;
// detritus consumption by zoobenthos [gD/m2/day]
tDConsDiatBent = sDDiatS / aDFoodBent * tDConsBent;
// diatoms consumption by zoobenthos [gD/m2/day]
tDConsGreenBent = sDGreenS / aDFoodBent * tDConsBent;
// greens consumption by zoobenthos [gD/m2/day]
tDConsBlueBent = sDBlueS / aDFoodBent * tDConsBent;
// blue-greens consumption by zoobenthos [gD/m2/day]
tDConsPhytBent = tDConsDiatBent + tDConsGreenBent + tDConsBlueBent;
// phytoplankton consumption by zoobenthos [gD/m2/day]
tDEgesBent = tDConsBent - tDAssBent;
// egestion of zoobenthos [gD/m2/day]

// loss processes in DW
// -----
aCorDRespBent = cPDBentRef / rPDBent;
// correction factor of zoobenthos respiration with respect to P/C ratio [-]
tDRespBent = aCorDRespBent * ukDRespTmBent * sDBent;
// respiration of zoobenthos [gD/m2/day]
tDMortBent = kMortBent*sDBent + (1.0 - aSatDBent) * tDEnvBent;
// zoobenthos mortality including environmental correction [gD/m2/day]

// migration
// -----
tDMigrBent = kMigrBent * (cDBentIn - sDBent);
// migration flux [gD/m2/day]
// note: migration included to prevent irreversible extinction

// zoobenthos processes in P
// -----
// grazing
// -----
aPFoodBent = sPDetS + sPAdsDetS + aPPhytS;
// food for zoobenthos [gP/m2]
rPDFoodBent = aPFoodBent / (aDFoodBent + NoZero);
// average P/D ratio of zoobenthos food [gP/gD]

tPConsDetBent = rPDFoodBent * tDConsDetBent;
// detrital P consumption by zoobenthos [gP/m2/day]
tPConsAdsDetBent = sPAdsDetS/sDDetS * tDConsDetBent;
// adsorbed P consumption by zoobenthos [gP/m2/day]
tPConsDiatBent = rPDiatS * tDConsDiatBent;
// diatom P consumption by zoobenthos [gP/m2/day]
tPConsGreenBent = rPDGreenS * tDConsGreenBent;
// greens P consumption by zoobenthos [gP/m2/day]
tPConsBlueBent = rPDBlueS * tDConsBlueBent;
// blue-greens P consumption by zoobenthos [gP/m2/day]
tPConsPhytBent = tPConsDiatBent + tPConsGreenBent + tPConsBlueBent;
// phytoplankton P consumption by zoobenthos [gP/m2/day]
tPConsBent = tPConsDetBent + tPConsAdsDetBent + tPConsPhytBent;
// total P consumption of zoobenthos [gP/m2/day]

// assimilation and egestion
// -----
aPAssBent = MIN(1.0, cPDBentRef/rPDFoodBent * fDAssBent);
// P assimilation efficiency of zoobenthos [-]
tPAssBent = aPAssBent * tPConsBent;
// P assimilation of zoobenthos [gP/m2/day]
tPEgesBent = tPConsBent - tPAssBent;
// egestion of zoobenthos [gP/m2/day]
tPEgesBentPD4 = fDissEgesBent * tPEgesBent;
// SRP egestion of zoobenthos [gP/m2/day]
tPEgesBentDet = (1.0 - fDissEgesBent) * tPEgesBent;
// detrital P egestion of zoobenthos [gP/m2/day]

// loss processes in P
// -----
aCorPExcrBent = rPDBent / cPDBentRef;
// correction factor of P excretion with respect to P/D ratio [-]
tPExcrBent = aCorPExcrBent * ukDRespTmBent * sPBent;
// P excretion of zoobenthos [1/day]
tPMortBent = rPDBent * tDMortBent;
// mortality of zoobenthos [gP/m2/day]
tPMortBentPD4 = fDissMortBent * tPMortBent;
// part of died zoobenthos P becoming dissolved P [gP/m2/day]
tPMortBentDet = (1.0 - fDissMortBent) * tPMortBent;
// part of died zoobenthos P becoming detrital P [gP/m2/day]

// migration
// -----
tPMigrBent = kMigrBent * (cPDBentRef * cDBentIn - sPBent);
// net migration flux [gP/m2/day]

```

```

// zoobenthos processes in N
// -----
// grazing
// -----
aNFoodBent = sNDetS + aNPhytS;
// food for zoobenthos [gN/m2]
rNDFoodBent = aNFoodBent / (aDFoodBent + NoZero);
// average N/D ratio of zoobenthos food [gN/gD]

tNConsDetBent = rNDFoodBent * tDConsDetBent;
// detrital N consumption by zoobenthos [gN/m2/day]
tNConsDiatBent = rNDiatS * tDConsDiatBent;
// diatom N consumption by zoobenthos [gN/m2/day]
tNConsGreenBent = rNDGreenS * tDConsGreenBent;
// greens N consumption by zoobenthos [gN/m2/day]
tNConsBlueBent = rNDBlueS * tDConsBlueBent;
// blue-greens N consumption by zoobenthos [gN/m2/day]
tNConsPhytBent = tNConsDiatBent + tNConsGreenBent + tNConsBlueBent;
// phytoplankton N consumption by zoobenthos [gN/m2/day]
tNConsBent = tNConsDetBent + tNConsPhytBent;
// total N consumption of zoobenthos [gN/m2/day]

// assimilation and egestion
// -----
aNAssBent = MIN(1.0, cNDBentRef/rNDFoodBent * fDAssBent);
// N assimilation efficiency of zoobenthos [-]
tNAssBent = aNAssBent * tNConsBent;
// N assimilation of zoobenthos [gN/m2/day]
tNEgesBent = tNConsBent - tNAssBent;
// egestion of zoobenthos [gN/m2/day]
tNEgesBentNH4 = fDissEgesBent * tNEgesBent;
// NH4 egestion of zoobenthos [gN/m2/day]
tNEgesBentDet = (1.0 - fDissEgesBent) * tNEgesBent;
// detrital N egestion of zoobenthos [gN/m2/day]

// loss processes in N
// -----
aCorNExcrBent = rNDBent / cNDBentRef;
// correction factor of N excretion with respect to N/D ratio [-]
tNExcrBent = aCorNExcrBent * ukDRespTmBent * sNBent;
// N excretion of zoobenthos [1/day]
tNMortBent = rNDBent * tDMortBent;
// mortality of zoobenthos [gN/m2/day]
tNMortBentNH4 = fDissMortBent * tNMortBent;
// part of died zoobenthos N becoming ammonium-N [gN/m2/day]
tNMortBentDet = (1.0 - fDissMortBent) * tNMortBent;
// part of died zoobenthos N becoming detrital N [gN/m2/day]

// migration
// -----
tNMigrBent = kMigrBent * (cNDBentRef * cDBentIn - sNBent);
// net migration flux [gN/m2/day]

// zoobenthos processes in S1
// -----
tS1ConsDetBent = rS1DDetS * tDConsDetBent;
// detritus consumption by zoobenthos [gS1/m2/day]
tS1ConsDiatBent = rS1DDiatS * tDConsDiatBent;
// diatom consumption by zoobenthos [gS1/m2/day]
tS1EgesBent = tS1ConsDetBent + tS1ConsDiatBent;
// S1 egestion by zoobenthos [gS1/m2/day]
// note: all S1 consumed is assumed being egested, as detrital S1

// processes of planktivorous/benthivorous fish
// -----
uSIN4PI121 = SIN(4.0*PI*(Time - cTimeLagMortFish) / DaysPerYear);
// sine function, used for fish and Pisc mortality

// environmental correction
// -----
kDAssTmFish = uFunTmFish * kDAssFish;
// fish assimilation rate [1/day]
ukDRespTmFish = uFunTmFish * kDRespFish;
// fish respiration rate [1/day]
IF(COS(2.0 * PI * Time / DaysPerYear) < 0.0)
  {ukMortFish = kMortFishMin;}
ELSE
  {ukMortFish = MAX(kMortFishMin, (kMortFishMax/2.0 + kMortFishMax/2.0 * uSIN4PI121));}
// END IF

// fish mortality rate [1/day]
ukDIncrFish = kDAssTmFish - ukDRespTmFish - ukMortFish;
// intrinsic net increase rate of fish [1/day]
tDEnvFish = MAX(0.0, ukDIncrFish / cDCarrFish * sDFish^2);
// environmental correction of fish [gD/m2/day]

// assimilation
// -----
aDFoodFish = cPrefZooFish * sDZoo * aDepthW + cPrefBentFish * sDBent + cPrefVegFish * sDVeg;
// fish food [gD/m2]
aSatDFish = aDFoodFish^2 / (hDFoodFish^2 + aDFoodFish^2);
// food limitation function of fish [-]
tDAssFish = aSatDFish * (kDAssTmFish * sDFish - tDEnvFish);
// assimilation of fish [gD/m2/day]

// grazing
// -----
tDConsFish = tDAssFish / fDAssFish;
// consumption of fish [gD/m2/day]
tDConsZooFish = cPrefZooFish * sDZoo * aDepthW / aDFoodFish * tDConsFish;
// zooplankton consumption by fish [gD/m2/day]
tDConsBentFish = cPrefBentFish * sDBent / aDFoodFish * tDConsFish;
// zoobenthos consumption by fish [gD/m2/day]
tDConsVegFish = cPrefVegFish * sDVeg / aDFoodFish * tDConsFish;
// plant consumption by fish [gD/m2/day]
tDEgesFish = tDConsFish - tDAssFish;
// egestion of fish [gD/m2/day]

// loss processes in DW
// -----
aCorDRespFish = cPDFishRef / rPDFish;

```



```

// correction factor of fish respiration with respect to P/C ratio [-]
tDRespFish = aCorDRespFish * ukDRespTmFish * sDFish;
// respiration of fish [gO2/m2/day]
tDMortFish = ukMortFish * sDFish + (1.0 - aSatDFish) * tDEnvFish;
// fish mortality including environmental correction [gO2/m2/day]
tDMortFishBot = fDBone * tDMortFish;
// part of died fish DW fixed in bones and scales [g/m2/day]
tDMortFishDet = tDMortFish - tDMortFishBot;
// part of died fish DW becoming detritus [gO2/m2/day]

// harvesting
// -----
tDHarvFish = kHarvFish * sDFish;
// harvesting of fish [gO2/m2/day]

// migration
// -----
tDMigrFish = kMigrFish * (cDFishIn - sDFish);
// migration flux [gO2/m2/day]
// note: migration included to prevent irreversible extinction

// whitefish processes in P
// -----
// grazing
// -----
aPFoodFish = cPrefZooFish * sPZoo * aDepthW + cPrefBentFish * sPBent + cPrefVegFish * sPVeg;
// fish food [gP/m2]
rPFoodFish = aPFoodFish / (aDFoodFish + NoZero);
// average P/D ratio of fish food [gP/gD]

tPConsZooFish = rPDZoo * tDConsZooFish;
// zooplankton P consumption by fish [gP/m2/day]
tPConsBentFish = rPDBent * tDConsBentFish;
// zoobenthos P consumption by fish [gP/m2/day]
tPConsVegFish = rPDVeg * tDConsVegFish;
// zoobenthos P consumption by fish [gP/m2/day]
tPConsFish = tPConsZooFish + tPConsBentFish + tPConsVegFish;
// total P consumption of fish [gP/m2/day]

// assimilation and egestion
// -----
aFAssFish = MIN(1.0, cPDFishRef/rPFoodFish * fDAssFish);
// P assimilation efficiency of fish [-]
tPAssFish = aFAssFish * tPConsFish;
// P assimilation of fish [gP/m2/day]
tPEgesFish = tPConsFish - tPAssFish;
// egestion of fish [gP/m2/day]
tPEgesFishPO4 = fDissEgesFish * tPEgesFish;
// SRP egestion of fish [gP/m2/day]
tPEgesFishDet = tPEgesFish - tPEgesFishPO4;
// detrital P egestion of fish [gP/m2/day]

// loss processes in P
// -----
aCorPExcrFish = rPDFish / cPDFishRef;
// correction factor of P excretion with respect to P/D ratio [-]
tPExcrFish = aCorPExcrFish * ukDRespTmFish * sPFish;
// P excretion of fish [1/day]
tPMortFish = rPDFish * tDMortFish;
// mortality of fish [gP/m2/day]
tPMortFishBot = fDBone * tPMortFish;
// part of died fish P fixed in bones and scales [gP/m2/day]
tPMortFishPO4 = fDissMortFish * (tPMortFish - tPMortFishBot);
// part of died fish P becoming dissolved P [gP/m2/day]
tPMortFishDet = tPMortFish - tPMortFishBot - tPMortFishPO4;
// part of died fish P becoming detrital P [gP/m2/day]

// harvesting
// -----
tPHarvFish = kHarvFish * sPFish;
// harvesting of fish [gP/m2/day]

// migration
// -----
tPMigrFish = kMigrFish * (cPDFishRef * cDFishIn - sPFish);
// net migration flux [gP/m2/day]

// whitefish processes in N
// -----
// grazing
// -----
aNFoodFish = cPrefZooFish * sNZoo * aDepthW + cPrefBentFish * sNBent + cPrefVegFish * sNVeg;
// fish food [gN/m2]
rNFoodFish = aNFoodFish / (aDFoodFish + NoZero);
// average N/D ratio of fish food [gN/gD]

tNConsZooFish = rNDZoo * tDConsZooFish;
// zooplankton N consumption by fish [gN/m2/day]
tNConsBentFish = rNDBent * tDConsBentFish;
// zoobenthos N consumption by fish [gN/m2/day]
tNConsVegFish = rNDVeg * tDConsVegFish;
// zoobenthos N consumption by fish [gN/m2/day]
tNConsFish = tNConsZooFish + tNConsBentFish + tNConsVegFish;
// total N consumption of fish [gN/m2/day]

// assimilation and egestion
// -----
aFNAssFish = MIN(1.0, cNDFishRef/rNFoodFish * fDAssFish);
// N assimilation efficiency of fish [-]
tFNAssFish = aFNAssFish * tNConsFish;
// N assimilation of fish [gN/m2/day]
tNEgesFish = tNConsFish - tFNAssFish;
// egestion of fish [gN/m2/day]
tNEgesFishNH4 = fDissEgesFish * tNEgesFish;
// ammonium egestion of fish [gN/m2/day]
tNEgesFishDet = (1.0 - fDissEgesFish) * tNEgesFish;
// detrital N egestion of fish [gN/m2/day]

// loss processes in N
// -----

```

```

aCorNExcrFish = rNDFish / cNDFishRef;
// correction factor of N excretion with respect to N/D ratio [-]
tNExcrFish = aCorNExcrFish * ukDRespTmFish * sNFish;
// N excretion of fish [1/day]
tNMortFish = rNDFish * tDMortFish;
// mortality of fish [gN/m2/day]
tNMortFishBot = fDBone * tNMortFish;
// part of died fish N fixed in bones and scales [gN/m2/day]
tNMortFishNH4 = fDissMortFish * (tNMortFish - tNMortFishBot);
// part of died fish N becoming ammonium [gN/m2/day]
tNMortFishDet = tNMortFish - tNMortFishBot - tNMortFishNH4;
// part of died fish N becoming detrital N [gN/m2/day]

// harvesting
// -----
tNHarvFish = kHarvFish * sNFish;
// harvesting of fish [gN/m2/day]

// migration
// -----
tNMigrFish = kMigrFish * (cNDFishRef * cDFishIn - sNFish);
// net migration flux [gN/m2/day]

// processes of piscivorous fish
// -----
uFunTmPisc = EXP(-0.5 / cSigTmPisc^2 * ((uTm - cTmOptPisc)^2 - (cTmRef - cTmOptPisc)^2));
// temperature function of Pisc [-]

// environmental correction
// -----
aFunDvegPisc = aDveg / (hDvegPisc + aDveg);
// vegetation dependence of Pisc growth rate [-]
akDAssTmPisc = aFunDvegPisc * uFunTmPisc * kDAssPisc;
// assimilation rate of Pisc, including vegetation dependence [1/day]
ukDRespTmPisc = uFunTmPisc * kDRespPisc;
// respiration rate of Pisc [1/day]
IF(COS(2.0 * Pi * Time / DaysPerYear) < 0.0)
  ukMortPisc = kMortPiscMin;
ELSE
  ukMortPisc = MAX(kMortPiscMin, (kMortPiscMax/2.0 + kMortPiscMax/2.0 *
uSIN4PiT121));
// END IF
// Pisc mortality rate [1/day]
akDIncrPisc = akDAssTmPisc - ukDRespTmPisc - ukMortPisc;
// intrinsic net increase rate of Pisc [1/day]
tDEnvPisc = MAX(0.0, akDIncrPisc / cDGarrPisc * sDPisc^2);
// environmental correction of Pisc [gD/m2/day]

// assimilation
// -----
aSatDPisc = aDFish^2 / (hDFishPisc^2 + aDFish^2);
// food limitation function of Pisc [-] (Changed 3/2/94)
tDAssPisc = aSatDPisc * (akDAssTmPisc * sDPisc - tDEnvPisc);
// assimilation of Pisc [gD/m2/day]

// grazing
// -----
tDConsPisc = tDAssPisc / fDAssPisc;
// consumption of Pisc [gD/m2/day]
tDConsFishPisc = sDFish * aDFish * tDConsPisc;
// fish consumption by Pisc [gD/m2/day]
tDEgesPisc = tDConsPisc - tDAssPisc;
// egestion of Pisc [gD/m2/day]

// loss processes in DW
// -----
tDRespPisc = ukDRespTmPisc * sDPisc;
// respiration of Pisc [gD/m2/day]
tDMortPisc = ukMortPisc * sDPisc + (1.0 - aSatDPisc) * tDEnvPisc;
// mortality of Pisc (including environmental correction) [gD/m2/day]
tDMortPiscBot = fDBone * tDMortPisc;
// part of died fish DW fixed in bones and scales [gD/m2/day]
tDMortPiscDet = tDMortPisc - tDMortPiscBot;
// part of died Pisc DW becoming detritus [gD/m2/day]

// harvesting
// -----
tDHarvPisc = kHarvPisc * sDPisc;
// harvesting of Pisc [gD/m2/day]

// migration
// -----
tDMigrPisc = kMigrPisc * (cDPiscIn - sDPisc);
// migration flux [gD/m2/day]
// note: migration included to prevent irreversible extinction

// Pisc processes in P
// -----
// grazing
// -----
tPConsPisc = rPDFish * tDConsPisc;
// P consumption of Pisc [gP/m2/day]
tPConsFishPisc = rPDFish * tDConsFishPisc;
// fish consumption by Pisc [gP/m2/day]

// assimilation and egestion
// -----
fPAssPisc = fDAssPisc;
// P assimilation efficiency of Pisc [-]
tPAssPisc = fPAssPisc * tPConsPisc;
// P assimilation of Pisc [gP/m2/day]
tPEgesPisc = tPConsPisc - tPAssPisc;
// egestion of Pisc [gP/m2/day]
tPEgesPiscPO4 = fDissEgesPisc * tPEgesPisc;
// SRP egestion of Pisc [gP/m2/day]
tPEgesPiscDet = tPEgesPisc - tPEgesPiscPO4;
// detrital P egestion of Pisc [gP/m2/day]

// loss processes in P
// -----
kPExcrTmPisc = ukDRespTmPisc;
// temperature corrected P excretion rate of Pisc [1/day]

```



```

tPEXcrPisc = kPEXcrTmPisc * sPPisc;
// respiration of Pisc [gP/m2/day]
tPMortPisc = rPDPisc * tDMortPisc;
// mortality of Pisc [gP/m2/day]
tPMortPiscBot = fPBone*tPMortPisc;
// part of died Pisc P fixed in bones and scales [gP/m2/day]
tPMortPiscPO4 = fDissMortPisc * (tPMortPisc - tPMortPiscBot);
// part of died fish P becoming dissolved P [gP/m2/day]
tPMortPiscDet = tPMortPisc - tPMortPiscBot - tPMortPiscPO4;
// part of died Pisc P becoming detrital P [gP/m2/day]

// harvesting
// -----
tPHarvPisc = kHarvPisc * sPPisc;
// harvesting of Pisc [gP/m2/day]

// migration
// -----
tPMigrPisc = kMigrPisc * (cPDPiscRef * cDPiscIn - sPPisc);
// net migration flux [gP/m2/day]

// Pisc processes in N
// -----
// grazing
// -----
tNConsPisc = rNDFish * tDConsPisc;
// N consumption of Pisc [gN/m2/day]
tNConsFishPisc = rNDFish * tDConsFishPisc;
// fish consumption by Pisc [gN/m2/day]

// assimilation and egestion
// -----
tNAssPisc = fDAssPisc;
// N assimilation efficiency of Pisc [-]
tNAssPisc = fNAssPisc * tNConsPisc;
// N assimilation of Pisc [gN/m2/day]
tNEgesPisc = tNConsPisc - tNAssPisc;
// egestion of Pisc [gN/m2/day]
tNEgesPiscNH4 = fDissEgesPisc * tNEgesPisc;
// NH4 egestion of Pisc [gN/m2/day]
tNEgesPiscDet = tNEgesPisc - tNEgesPiscNH4;
// detrital N egestion of Pisc [gN/m2/day]

// loss processes in N
// -----
ukNEXcrTmPisc = ukDRespTmPisc;
// temperature corrected N excretion rate of Pisc [1/day]
tNEXcrPisc = ukNEXcrTmPisc * sNPisc;
// respiration of Pisc [gN/m2/day]
tNMortPisc = rNDPisc * tDMortPisc;
// mortality of Pisc [gN/m2/day]
tNMortPiscBot = fDBone * tNMortPisc;
// part of died Pisc N fixed in bones and scales [gN/m2/day]
tNMortPiscNH4 = fDissMortPisc * (tNMortPisc - tNMortPiscBot);
// part of died fish N becoming ammonium-N [gN/m2/day]
tNMortPiscDet = tNMortPisc - tNMortPiscBot - tNMortPiscNH4;
// part of died Pisc N becoming detrital N [gN/m2/day]

// harvesting
// -----
tNHarvPisc = kHarvPisc * sNPisc;
// harvesting of Pisc [gN/m2/day]

// migration
// -----
tNMigrPisc = kMigrPisc * (cNDPiscRef * cDPiscIn - sNPisc);
// net migration flux [gN/m2/day]

// total fluxes
// -----
// DW fluxes
// -----
// DW fluxes in water
// -----
wWebDetW = - wDConsDetZoo + wEgesZoo + wDMortZoo + (tDEgesFish + tDMortFishDet
+ tDEgesPisc + tDMortPiscDet) / aDepthW;
// detritus [mg/l/day]
wWebDiatW = - wDConsDiatZoo;
// diatoms [mg/l/day]
wWebGreenW = - wDConsGreenZoo;
// greens [mg/l/day]
wWebBlueW = - wDConsBlueZoo;
// blue-greens [mg/l/day]
wWebZoo = wDAssZoo - wDRespZoo - wDMortZoo - tDConsZooFish / aDepthW;
// herbivorous zooplankton [mg/l/day]
tDWebFish = tDMigrFish + tDAssFish - tDRespFish - tDMortFish - tDConsFishPisc -
tDHarvFish;
// fish [g/m2/day]
tDWebPisc = tDMigrPisc + tDAssPisc - tDRespPisc - tDMortPisc - tDHarvPisc;
// predatory fish [g/m2/day]
tDWebVeg = - tDConsVegFish;

// DW fluxes in sediment
// -----
tDWebDetS = - tDConsDetBent + tDEgesBent + tDMortBent;
// sediment detritus [gDW/m2/day]
tDWebDiatS = - tDConsDiatBent;
// sediment diatoms [g/m2/day]
tDWebGreenS = - tDConsGreenBent;
// sediment greens [g/m2/day]
tDWebBlueS = - tDConsBlueBent;
// sediment blue-greens [g/m2/day]
tDWebBent = tDMigrBent + tDAssBent - tDConsBentFish - tDRespBent - tDMortBent;
// zoobenthos [gDW/m2/day]

// P fluxes
// -----
// P fluxes in water
// -----
wWebPO4W = wPEXcrZoo + wPEgesZooPO4 + wPMortZooPO4 + (tPEXcrFish + tPEgesFishPO4

```

```

+ tPMortFishPO4 + tPEXcrPisc + tPEgesPiscPO4 + tPMortPiscPO4) / aDepthW;
// SRP in water [mgP/l/day]
wWebAdsDetW = - wPConsAdsDetZoo;
// P-adsorbed onto detritus in water [mgP/l/day]
wWebDetW = - wPConsDetZoo + wPEgesZooDet + wPMortZooDet + (tPEgesFishDet +
tPMortFishDet + tPEgesPiscDet + tPMortPiscDet) / aDepthW;
// detritus [mgP/l/day]
wWebDiatW = - wPConsDiatZoo;
// diatoms [mgP/l/day]
wWebGreenW = - wPConsGreenZoo;
// greens [mgP/l/day]
wWebBlueW = - wPConsBlueZoo;
// blue-greens [mgP/l/day]
wWebZoo = wPAssZoo - wPEXcrZoo - wPMortZoo - tPConsZooFish / aDepthW;
// herbivorous zooplankton [mgP/l/day]
tPWebFish = tPMigrFish + tPAssFish - tPEXcrFish - tPMortFish - tPConsFishPisc -
tPHarvFish;
// fish [gP/m2/day]
tPWebPisc = tPMigrPisc + tPAssPisc - tPEXcrPisc - tPMortPisc - tPHarvPisc;
// predatory fish [gP/m2/day]
tPWebVeg = - tPConsVegFish;

// P fluxes in sediment
// -----
tPWebPO4S = tPEXcrBent + tPEgesBentPO4 + tPMortBentPO4;
// pore water P [gP/m2/day]
tPWebAdsDetS = - tPConsAdsDetBent;
// P-adsorbed onto detritus in sediment [gP/m2/day]
tPWebDetS = - tPConsDetBent + tPEgesBentDet + tPMortBentDet;
// sediment P [gP/m2/day]
tPWebDiatS = - tPConsDiatBent;
// sediment diatoms [gP/m2/day]
tPWebGreenS = - tPConsGreenBent;
// sediment greens [gP/m2/day]
tPWebBlueS = - tPConsBlueBent;
// sediment blue-greens [gP/m2/day]
tPWebBent = tPMigrBent + tPAssBent - tPConsBentFish - tPEXcrBent - tPMortBent;
// zoobenthos P [gP/m2/day]

// N fluxes
// -----
// N fluxes in water
// -----
wWebNH4W = wNEXcrZoo + wNEgesZooNH4 + wNMortZooNH4 + (tNEXcrFish + tNEgesFishNH4
+ tNMortFishNH4 + tNEXcrPisc + tNEgesPiscNH4 + tNMortPiscNH4) / aDepthW;
// ammonium in water [mgN/l/day]
wWebNO3W = 0.0;
// nitrate in water [mgN/l/day]
wWebDetW = - wNConsDetZoo + wNEgesZooDet + wNMortZooDet + (tNEgesFishDet +
tNMortFishDet + tNEgesPiscDet + tNMortPiscDet) / aDepthW;
// detritus [mgN/l/day]
wWebDiatW = - wNConsDiatZoo;
// diatoms [mgN/l/day]
wWebGreenW = - wNConsGreenZoo;
// greens [mgN/l/day]
wWebBlueW = - wNConsBlueZoo;
// blue-greens [mgN/l/day]
wWebZoo = wNAssZoo - wNEXcrZoo - wNMortZoo - tNConsZooFish / aDepthW;
// herbivorous zooplankton [mgN/l/day]
tNWebFish = tNMigrFish + tNAssFish - tNEXcrFish - tNMortFish - tNConsFishPisc -
tNHarvFish;
// fish [gN/m2/day]
tNWebPisc = tNMigrPisc + tNAssPisc - tNEXcrPisc - tNMortPisc - tNHarvPisc;
// predatory fish [gN/m2/day]
tNWebVeg = - tNConsVegFish;

// N fluxes in sediment
// -----
tNWebNH4S = tNEXcrBent + tNEgesBentNH4 + tNMortBentNH4;
// pore water ammonium [gN/m2/day]
tNWebNO3S = 0.0;
// pore water nitrate [gN/m2/day]
tNWebDetS = - tNConsDetBent + tNEgesBentDet + tNMortBentDet;
// sediment N [gN/m2/day]
tNWebDiatS = - tNConsDiatBent;
// sediment diatoms [gN/m2/day]
tNWebGreenS = - tNConsGreenBent;
// sediment greens [gN/m2/day]
tNWebBlueS = - tNConsBlueBent;
// sediment blue-greens [gN/m2/day]
tNWebBent = tNMigrBent + tNAssBent - tNConsBentFish - tNEXcrBent - tNMortBent;
// zoobenthos N [gN/m2/day]

// silica fluxes
// -----
wSiWebSiO2W = 0.0;
// dissolved SiO2 [mgSi/l/day]
wSiWebDetW = - wSiConsDetZoo + wSiEgesZoo;
// detritus [mgSi/l/day]
wSiWebDiatW = - wSiConsDiatZoo;
// diatoms [mgSi/l/day]

tSiWebDetS = - tSiConsDetBent + tSiEgesBent;
// sediment detritus [gSi/m2/day]
tSiWebDiatS = - tSiConsDiatBent;
// sediment diatoms [gSi/m2/day]

// mass-balance check
// -----
tWebIn = - wDRespZoo * aDepthW + tDMigrFish - tDRespFish - tDHarvFish - tDMortFishBot
+ tDMigrPisc - tDRespPisc - tDHarvPisc - tDMortPiscBot + tDMigrBent -
tDRespBent;
// total DW flux in WEB module into the system [gDW/m2/day]
tWebIn = tPMigrFish - tPHarvFish - tPMortFishBot + tPMigrPisc - tPHarvPisc -
tPMortPiscBot + tPMigrBent;
// total P flux in WEB module into the system [gP/m2/day]
tWebIn = tNMigrFish - tNHarvFish - tNMortFishBot + tNMigrPisc - tNHarvPisc -
tNMortPiscBot + tNMigrBent;
// total N flux in WEB module into the system [gN/m2/day]

// extra output variables
// -----
aPrefAve = (cPrefDiat * sDDiatW + cPrefGreen * sDGreenW + cPrefBlue * sDBlueW +

```

```

cPrefDet * sDetW) / cDDM;
// average selection factor [-]
aFilt = cFiltMax * uFunTzoo * hFilt / (hFilt + cDDM);
// filtering rate [1/mgDW/day]
wDConsZoo2 = aFilt * aPrefAve * cDDM * sDZoo;
// total zooplankton consumption (check) [mg/1/day]

aDConsZoo5p = wDConsZoo / sDZoo;
// specific consumption rate of zooplankton (daily ration) [1/day]
aDAssZoo5p = wDAssZoo / sDZoo;
// specific C assimilation of zooplankton [1/day]
aDGraz5p = wDConsZoo / cDDM;
// specific DW grazing (daily grazing) [1/day]
aPConsZoo5p = wPConsZoo / sPZoo;
// specific P consumption or daily ration [1/day]
aPGraz5p = wPConsZoo / cDDM;
// specific P grazing or daily grazing [1/day]

aNCConsZoo5p = wNCConsZoo / sNZoo;
// specific N consumption or daily ration [1/day]
aNNGraz5p = wNCConsZoo / cDDM;
// specific N grazing or daily grazing [1/day]

IF (UseWeb == 0)
{
wWebDetW = 0.0; wWebDiatW = 0.0; wWebGreenW = 0.0; wWebBlueW = 0.0;
wWebZoo = 0.0; tWebFish = 0.0; tWebPisc = 0.0; tWebDets = 0.0;
tWebDiatS = 0.0; tWebGreenS = 0.0; tWebBlueS = 0.0; tWebBent = 0.0;

wWebPO4W = 0.0; wWebAdsDetW = 0.0; wWebDetW = 0.0; wWebDiatW = 0.0;
wWebGreenW = 0.0; wWebBlueW = 0.0; wWebZoo = 0.0; tWebFish = 0.0;
tWebPisc = 0.0; tWebPO4S = 0.0; tWebAdsDets = 0.0; tWebDets = 0.0;
tWebDiatS = 0.0; tWebGreenS = 0.0; tWebBlueS = 0.0; tWebBent = 0.0;

wWebNH4W = 0.0; wWebNO3W = 0.0; wWebDetW = 0.0; wWebDiatW = 0.0;
wWebGreenW = 0.0; wWebBlueW = 0.0; wWebZoo = 0.0; tWebFish = 0.0;
tWebPisc = 0.0; tWebNH4S = 0.0; tWebNO3S = 0.0; tWebDets = 0.0;
tWebDiatS = 0.0; tWebGreenS = 0.0; tWebBlueS = 0.0; tWebBent = 0.0;

wSiWebSiO2W = 0.0; wSiWebDetW = 0.0; wSiWebDiatW = 0.0; tSiWebDets = 0.0;
tSiWebDiatS = 0.0;

tWebIn = 0.0; tWebIn = 0.0; tWebIn = 0.0;
// all flux (re)set to zero when foodweb is not used
}
// END IF

// vegetation processes
// -----
aDRootVeg = fRootVeg * sDVeg;
// root biomass [g/m2]
aDCarrVeg = cDCarrVeg;
// maximum carrying capacity of vegetation [gDW/m2]
tDMigrVeg = kMigrVeg * (cDVegIn - sDVeg);
// migration flux [gDW/m2/day]
// note: "migration" included to prevent irreversible extinction

// germination
// -----
IF (Time - YearNumber * DaysPerYear >= cTimeGermVeg && Time - YearNumber * Days-
PerYear < cTimeGermVeg + 1.0)
{tDGermVeg = cDGermVeg;}
ELSE
{tDGermVeg = 0.0;}
// END IF
// germination flux [gDW/m2/day]

// production
// -----
uFunTveg = EXP(-0.5 / (cSigTveg^2)) * ((uTm - cTmOptVeg)^2 - (cTmRef - cTmOpt-
Veg)^2);
// temperature function of vegetation production [-]
uProdMaxTveg = uFunTveg * cPProdMaxVeg;
// maximum production rate of shoot at ambient temperature [mgO2/g/h]
uHLVeg = hLRefVeg * uFunTveg;
// half-saturating light for vegetation production at current temperature
[W/m2]
uMuMaxTveg = uProdMaxTveg * cDWPerO2Veg / mgPerg * HoursPerDay;
// maximum growth rate of shoot at current temperature [1/day]

aFunLProdVeg = 1.0 / aExt2Depth * LN( (1.0 + aLPARI / uHLVeg) / (1.0 + aLPARBot /
uHLVeg) );
// light function of production [-]
aMuTmVeg = fShootVeg * uDayLeng * aFunLProdVeg * uMuMaxTveg;
// maximum growth rate of whole vegetation at current light and temperature
[1/day]
aFunPProdVeg = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cPDVegMin / rPDVeg) * cPDVegMax / (cPDVegMax -
cPDVegMin)), 0.0);
// Droop function (P) for vegetation [-]
aFunNProdVeg = MAX(MIN(1.0, (1.0 - cNDVegMin / rNDVeg) * cNDVegMax / (cNDVegMax -
cNDVegMin)), 0.0);
// Droop function (N) for vegetation [-]
aFunNutProdVeg = MIN(aFunPProdVeg, aFunNProdVeg);
// nutrient limitation function of vegetation [-]
aMuVeg = aMuTmVeg * aFunNutProdVeg;
// actual growth rate of vegetation [1/day]

// loss processes
// -----
ukDRespTveg = kDRespVeg * uFunTveg;
// temperature corrected dark respiration constant of vegetation [g/m2/day]
tDRespVeg = ukDRespTveg * sDVeg;
// dark respiration flux of vegetation [g/m2/day]

uFunTimeMortVeg = SIN( 2.0 * PI * (Time - cTimeLagMortVeg) / DaysPerYear);
// time function for vegetation mortality
IF( uFunTimeMortVeg > 0.0 )
{ukMortVeg = kMortVegMin;}
ELSE
{ukMortVeg = kMortVegMax;}
// END IF
// mortality low between cTimeLagMort and 183 + cTimeLagMort, otherways high
aKIncrVeg = aMuTmVeg - ukDRespTveg - ukMortVeg;
// intrinsic net increase rate of vegetation [1/day]
IF(sDVeg = aDCarrVeg)
{tDEnvVeg = MAX(0.0, aKIncrVeg / (aDCarrVeg + NoZero) * sDVeg^2);}
// environmental correction of vegetation [gDW/m2/day]
// note: cannot be negative
ELSE
{tDEnvVeg = aMuTmVeg * sDVeg;}
// note: this is a safety equation, in case biomass would be higher
then // carrying capacity tDEnvVeg is maximal
// END IF

tDMortVeg = ukMortVeg * sDVeg + (1.0 - aFunNutProdVeg) * tDEnvVeg;
// mortality flux of vegetation (including environmental correction)
[g/m2/day]
tDMortVegW = fDetMortVeg * (1.0 - fRootVeg) * tDMortVeg;
// mortality flux becoming water detritus [g/m2/day] (= part of the shoot
mortality only)
tDMortVegS = tDMortVeg - tDMortVegW;
// mortality flux becoming sediment detritus [g/m2/day] (= root mortality +
part of shoot mortality)

// grazing by herbivorous birds
// -----
tDGrazVegCoot = sDVeg / (hDVegCoot + sDVeg) * cNRCoots / m2Perha * cDGrazPerCoot;
// biomass loss due to grazing of coots [g/m2/day]

// environmental corrected growth of vegetation
// -----
tDProdVeg = aFunNutProdVeg * (aMuTmVeg * sDVeg - tDEnvVeg);
// vegetation production flux [g/m2/day]

// vegetation P processes
// -----
tPMigrVeg = kMigrVeg * (cPDVegRef * cDVegIn - sPVeg);
// net migration flux [gP/m2/day]
tPGermVeg = cPDVegRef * tDGermVeg;
// germination flux [gP/m2/day]

// phosphorus uptake by vegetation
// -----
aVPuptMaxCorVeg = MAX( 0.0, cVPuptMaxVeg * uFunTveg * (cPDVegMax - rPDVeg) /
(cPDVegMax - cPDVegMin));
// maximum P uptake rate of vegetation, corrected for P/D ratio
aVPuptVegW = sPO4W * aVPuptMaxCorVeg / (aVPuptMaxCorVeg / cAffVPuptVeg + sPO4W);
// P uptake rate of shoots [mgP/mgDW/day]
tVPuptVegW = aVPuptVegW * aDShootVeg;
// P uptake from water (by shoots) [gP/m2/day]
aVPuptVegS = aPO4S * aVPuptMaxCorVeg / (aVPuptMaxCorVeg / cAffVPuptVeg + aPO4S);
// P uptake rate of roots [mgP/mgDW/day]
tVPuptVegS = aVPuptVegS * aDRootVeg;
// P uptake from pore water (by roots) [gP/m2/day]

tVPuptVeg = tVPuptVegW + tVPuptVegS;
// total P uptake vegetation [gP/m2/day]

kVPuptVeg = tVPuptVeg / sPVeg;
// nitrogen uptake rate (MJ)

// P excretion
// -----
uHPDvegExcr = cReINutExcrVeg * cPDVegMin;
// half saturation P content for excretion [gP/gD]
aKPExcrTveg = rPDVeg / (uHPDvegExcr + rPDVeg) * (cPDVegMax + uHPDvegExcr) / cPD-
VegMax * uKDRespTveg;
// P excretion rate [1/day]
// note: = 1 if P/D ratio is maximal
tPExcrVeg = aKPExcrTveg * sPVeg;
// P excretion by vegetation [gP/m2/day]
tPExcrVegS = fRootVeg * tPExcrVeg;
// P excretion by vegetation to sediment [gP/m2/day]
tPExcrVegW = tPExcrVeg - tPExcrVegS;
// P excretion by vegetation to water [gP/m2/day]

// P mortality
// -----
tPMortVeg = rPDVeg * tDMortVeg;
// mortality of vegetation in P [mgP/m2]
tPMortVegPO4 = fDissMortVeg * tPMortVeg;
// soluble P flux from died vegetation [mgP/m2]
tPMortVegPO4S = fRootVeg * tPMortVegPO4;
// soluble P flux from died vegetation to sediment [mgP/m2]
tPMortVegPO4W = tPMortVegPO4 - tPMortVegPO4S;
// soluble P flux from died vegetation to water [mgP/m2]
tPMortVegDet = tPMortVeg - tPMortVegPO4;
// detrital P flux from died vegetation [mgP/m2]
tPMortVegDetW = fDetMortVeg * (1.0 - fRootVeg) * tPMortVegDet;
// detrital P flux from died vegetation to water [mgP/m2]
tPMortVegDetS = tPMortVegDet - tPMortVegDetW;
// detrital P flux from died vegetation to sediment [mgP/m2]

// grazing by coots
// -----
tPGrazVegCoot = rPDVeg * tDGrazVegCoot;
// grazing loss of vegetation in P [gP/m2]

// vegetation processes in N
// -----
tNMigrVeg = kMigrVeg * (cNDVegRef * cDVegIn - sNVeg);
// net migration flux [gN/m2/day]
tNGermVeg = cNDVegRef * tDGermVeg;
// germination flux [gN/m2/day]

// nitrogen uptake by vegetation
// -----
aVNuptMaxCorVeg = MAX( 0.0, cVNuptMaxVeg * uFunTveg * (cNDVegMax - rNDVeg) /
(cNDVegMax - cNDVegMin));
// maximum N uptake rate of vegetation, corrected for N/D ratio
aHNuptVeg = aVNuptMaxCorVeg / cAffNuptVeg;
// half-saturating constant for N uptake [gN/m3]

aVNuptVegW = aNDissW * aVNuptMaxCorVeg / (aHNuptVeg + aNDissW);
// N uptake rate of shoots [mgN/mgDW/day]
tNuptVegW = aVNuptVegW * aDShootVeg;

```



```

// N uptake from water (by shoots) [gN/m2/day]
aFNH4UptVegW = sNH4W * sNO3W / ((aHNUpVegW + sNH4W) * (aHNUpVegW + sNO3W)) +
sNH4W * aHNUpVegW / ((sNH4W + sNO3W) * (aHNUpVegW + sNO3W));
// fraction ammonium uptake by shoots [-] note: preference
// note: from WASP model (EPA)
tNUptNH4VegW = aFNH4UptVegW * tNUptVegW;
// NH4 uptake of vegetation from water [gN/m2/day]
tNUptNO3VegW = tNUptVegW - tNUptNH4VegW;
// NO3 uptake of vegetation from water [gN/m2/day]

aVNUptVegS = oNDissS * aVNUptMaxCorVeg / (aHNUpVegW + oNDissS);
// N uptake rate of roots [mgN/mgDW/day]
tNUptVegS = aVNUptVegS * aDRootVeg;
// N uptake from pore water (by roots) [gN/m2/day]
aFNH4UptVegS = oNH4S * oNO3S / ((aHNUpVegW + oNH4S) * (aHNUpVegW + oNO3S)) +
oNH4S * aHNUpVegW / ((oNH4S + oNO3S) * (aHNUpVegW + oNO3S));
// fraction ammonium uptake by shoots [-] note: preference
// note: from WASP model (EPA)
tNH4UptVegS = aFNH4UptVegS * tNUptVegS;
// NH4 uptake of vegetation from sediment [gN/m2/day]
tNUptNO3VegS = tNUptVegS - tNH4UptVegS;
// NO3 uptake of vegetation from sediment [gN/m2/day]

tNUptVeg = tNUptVegW + tNUptVegS;
// total N uptake vegetation [gN/m2/day]

kNUptVeg = tNUptVeg / sNVeg;
// nitrogen uptake rate (MJ)

// N Excretion
// -----
uHNDVegExcr = cReNutExcrVeg * cNDVegMin;
// half saturation N content for excretion [gN/gD]
aKExcrVeg = rNDVeg / (uHNDVegExcr + rNDVeg) * (cNDVegMax + uHNDVegExcr) / cND-
VegMax * uKDRestVeg;
// N excretion rate [1/day]
// note: = 1 if N/D ratio is maximal
tNExcrVeg = aKExcrVeg * sNVeg;
// N excretion by vegetation [gN/m2/day]
tNExcrVegS = rRootVeg * tNExcrVeg;
// N excretion by vegetation to sediment [gN/m2/day]
tNExcrVegW = tNExcrVeg - tNExcrVegS;
// N excretion by vegetation to water [gN/m2/day]

// N mortality
// -----
tNMortVeg = rNDVeg * tDMortVeg;
// mortality of vegetation in N [mgN/m2]
tNMortVegNH4 = fDissMortVeg * tNMortVeg;
// soluble N flux from died vegetation [mgN/m2]
tNMortVegNH4S = fRootVeg * tNMortVegNH4;
// soluble N flux from died vegetation to sediment [mgN/m2]
tNMortVegNH4W = tNMortVegNH4 - tNMortVegNH4S;
// soluble N flux from died vegetation to water [mgN/m2]
tNMortVegDet = tNMortVeg - tNMortVegNH4;
// detrital N flux from died vegetation [mgN/m2]
tNMortVegDetW = fDetMortVeg * (1.0 - fRootVeg) * tNMortVegDet;
// detrital N flux from died vegetation to water [mgN/m2]
tNMortVegDetS = tNMortVegDet - tNMortVegDetW;
// detrital N flux from died vegetation to sediment [mgN/m2]

// grazing by coots
// -----
tNGrazVegCoot = rNDVeg * tDGrazVegCoot;
// note: grazing by fish defined in food-web module (if used)

// total fluxes
// -----
tDBedVeg = tDMigrVeg + tDGermVeg + tDProdVeg - tDRespVeg - tDMortVeg - tDGrazVeg-
Coot;
// total vegetation biomass [gDW/m2/day]
tPBedVeg = tPMigrVeg + tPGermVeg + tPUptVeg - tPExcrVeg - tPMortVeg - tPGrazVeg-
Coot;
// total vegetation biomass [gP/m2/day]
tNBedVeg = tNMigrVeg + tNGermVeg + tNUptVeg - tNExcrVeg - tNMortVeg - tNGrazVeg-
Coot;
// total vegetation biomass [gN/m2/day]

// assimilation and egestion by herbivorous birds
// -----
// note: assimilation efficiency (fDAssCoot) assumed equal for D,P and N
tDAssVegCoot = fDAssCoot * tDGrazVegCoot;
// assimilation of coots [gDW/m2/day]
tDEgesCoot = tDGrazVegCoot - tDAssVegCoot;
// egestion by coots [gDW/m2/day]

tPAssVegCoot = fDAssCoot * tPGrazVegCoot;
// P assimilation of coots [gP/m2/day]
tPEgesCoot = tPGrazVegCoot - tPAssVegCoot;
// P egestion by coots [gP/m2/day]
tPEgesCootP04 = fDissEgesCoot * tPEgesCoot;
// dissolved fraction of P egestion by coots [gP/m2/day]
tPEgesCootDet = tPEgesCoot - tPEgesCootP04;
// detrital fraction of P egestion by coots [gP/m2/day]

tNAssVegCoot = fDAssCoot * tNGrazVegCoot;
// N assimilation of coots [gN/m2/day]
tNEgesCoot = tNGrazVegCoot - tNAssVegCoot;
// N egestion by coots [gN/m2/day]
tNEgesCootNH4 = fDissEgesCoot * tNEgesCoot;
// dissolved fraction of N egestion by coots [gN/m2/day]
tNEgesCootDet = tNEgesCoot - tNEgesCootNH4;
// detrital fraction of N egestion by coots [gN/m2/day]

// total fluxes from vegetation module
// -----
wDBedDetW = (tDMortVegW + tDEgesCootW) / aDepthW;
// total DW flux from vegetation module to water detritus [gDW/m3/day]
tDBedDetS = tDMortVegS - tDGermVeg;
// total DW flux from vegetation module to sediment detritus [gDW/m2/day]

wPBedP04W = (- tPUptVegW + tPExcrVegW + tPMortVegP04W + tPEgesCootP04) / aDepthW;

```



```

tPAbioDetS = tPSetDet - tPResusDet + tPInfDet - tPBurDet;
// total P flux from abiotic module to sediment detritus [gP/m2/day]
tPAbioP04S = - tPBurP04 - tPInfP04 - tPResusP04 + tPInfP04W - tPInfP04S - tPChemP04;
// total 'slow' P flux from abiotic module to pore water P04 [gP/m2/day]
tPAbioAdsIMS = tPSetAdsIM - tPResusAdsIM + tPInfAdsIM - tPBurAdsIM;
// total 'slow' P flux from abiotic module to P adsorbed onto sediment inorganic matter [gP/m2/day]
tPAbioAdsDetS = tPSetAdsDet - tPResusAdsDet + tPInfAdsDet - tPBurAdsDet;
// total 'slow' P flux from abiotic module to P adsorbed onto sediment detritus [gP/m2/day]

// fluxes for N states
// -----
wNAbioN03W = (tNDInfN03 + tNResusN03 - tNInfN03W) / aDepthW;
// total N flux from abiotic module to N03 in water [gN/m3/day]
wNAbioNH4W = (tNDInfNH4 + tNResusNH4 - tNInfNH4W) / aDepthW;
// total N flux from abiotic module to NH4 in water [gN/m3/day]
wNAbioDetM = (- tNSetDet + tNResusDet - tNInfDet) / aDepthW;
// total N flux from abiotic module to water detritus [gN/m3/day]

tNAbioN03S = - tNDInfN03 - tNResusN03 - tNBurN03 + tNInfN03W - tNInfN03S;
// total N flux from abiotic module to N03 in pore water [gN/m2/day]
tNAbioNH4S = - tNDInfNH4 - tNResusNH4 - tNBurNH4 + tNInfNH4W - tNInfNH4S;
// total N flux from abiotic module to NH4 in pore water [gN/m2/day]
tNAbioDetS = tNSetDet - tNResusDet + tNInfDet - tNBurDet;
// total N flux from abiotic module to sediment detritus [gN/m2/day]

// fluxes for Si states
// -----
wSiAbioSiO2W = - tSiInfSiO2W / aDepthW;
// total Si flux from abiotic module to SiO2 in water [gSi/m3/day]
wSiAbioDetW = (- tSiSetDet + tSiResusDet - tSiInfDet) / aDepthW;
// total Si flux from abiotic module to water detritus [gSi/m3/day]
tSiAbioDetS = tSiSetDet - tSiResusDet + tSiInfDet - tSiBurDet;
// total Si flux from abiotic module to sediment detritus [gSi/m2/day]

// mass-balance check
// -----
tDAbioIn = - tDBurTot;
// total DW flux of abiotic module into the system [gDW/m2/day]
tPAbioIn = - tPBurTot - tPChemP04 - tPInfP04S;
// total P flux of abiotic module into the system [gP/m2/day]
tNAbioIn = - tNBurTot - tNInfNH4S - tNInfN03S;
// total N flux of abiotic module into the system [gN/m2/day]
tSiAbioIn = - tSiBurTot - tSiInfSiO2W;
// total Si flux of abiotic module into the system [gSi/m2/day]

// additional output
// -----
tPSetTot = tPSetDet + tPSetAdsDet + tPSetAdsIM + tPSetPhyt;
// total P sedimentation flux [gP/m2/day]
tNSetTot = tNSetDet + tNSetPhyt;
// total N sedimentation flux [gN/m2/day]
tPResusTot = tPResusDet + tPResusAdsIM + tPResusAdsDet + tPResusPhyt + tPResusP04;
// total P resuspension flux [gP/m2/day]
tNResusTot = tNResusDet + tNResusNH4 + tNResusN03 + tNResusPhyt;
// total N resuspension flux [gN/m2/day]

tDInfDead = tDInfDet + tDInfIM;
// abiotic DW infiltration [gD/m2/day]
tDInfTot = tDInfDead + tDInfPhyt;
// total DW infiltration [gD/m2/day]
tPInfDead = tPInfP04W + tPInfDet + tPInfAdsDet + tPInfAdsIM;
// abiotic P infiltration [gP/m2/day]
tPInfTotW = tPInfDead + tPInfPhyt;
// total P infiltration [gP/m2/day]
tNInfDead = tNInfDet + tNInfNH4W + tNInfN03W;
// abiotic N infiltration [gN/m2/day]
tNInfTotW = tNInfDead + tNInfPhyt;
// total N infiltration [gN/m2/day]
tSiInfDead = tSiInfDet + tSiInfSiO2W;
// Si infiltration of dead matter [gSi/m2/day]
tSiInfTotW = tSiInfDead + tSiInfDiat;
// total Si infiltration [gSi/m2/day]

// external loading
// -----
uPLoad = cPLoadmg / mgPerg;
// total external P loading [g/m2/d]
// conversion of P loading from mgP/m2/d to gP/m2/d
uPLoadP04 = fP04PLoad * uPLoad;
// external SRP load [gP/m2/d]
uPLoadDet = uPLoad - uPLoadP04;
// external detrital P load [gP/m2/d]
uDLoadDet = uPLoadDet / cPDDetIn;
// external detrital D load [gDW/m2/d]
cNDDetIn = cNPRatioLoad * cPDDetIn;
// N/D ratio of external detrital load [mgN/mgDW]
uNLoad = cNLoadmg / mgPerg;
// total external N loading [g/m2/d]
// conversion of N loading from mgN/m2/d to gN/m2/d
uNLoadDet = cNDDetIn * uLoadDet;
// external detrital N load [gN/m2/d]
uNLoadDiss = uNLoad - uNLoadDet;
// external dissolved N loading [gN/m2/d]
uNLoadNH4 = fNH4NLoadDiss * uNLoadDiss;
// external NH4 load [gN/m2/d]
uNLoadN03 = uNLoadDiss - uNLoadNH4;
// external N03 load [gN/m2/d]
uSiLoadDet = cSiDDetIn * uLoadDet;
// external detrital Si load [gSi/m2/d]

// derivatives of state variables
// -----
// dry weight derivatives
// -----
dDiatW = wDPrimDiatW + wWebDiatW;
// diatoms [mg/1/day]
dGreenW = wDPrimGreenW + wWebGreenW;
// greens [mgP/1/day]
dBleueW = wDPrimBleueW + wWebBleueW;
// blue-greens [mgP/1/day]
dP04W = wPAbioP04W + wPPrimP04W + wPBedP04W + uPLoadP04 / aDepthW;
// SRP in water [mgP/1/day]
dPAdsIMW = wPAbioAdsIMW;
// P-adsorbed onto IM in water [mgP/1/day]
dPAdsDetW = wPAbioAdsDetW + wPWebAdsDetW;
// blue-greens [mg/1/day]
dDIMW = wDAbioIMW;
// inert matter in water [mg/1/day]
dDetW = wDAbioDetW + wDPrimDetW + wWebDetW + wDBedDetW + uLoadDet / aDepthW;
// detritus [mg/1/day]
dZoo = wDWebZoo;
// Herbivorous zooplankton [mg/1/day]
dFish = tDWebFish;
// Fish [g/m2/day]
dPisc = tDWebPisc;
// predatory fish [g/m2/day]
dVeg = tDBedVeg + tDWebVeg;
// submerged vegetation [g/m2/day]
dDiatS = tDPrimDiatS + tDWebDiatS;
// Sediment diatoms [g/m2/day]
dGreenS = tDPrimGreenS + tDWebGreenS;
// Sediment greens [g/m2/day]
dBleueS = tDPrimBleueS + tDWebBleueS;
// Sediment blue-greens [g/m2/day]
dBent = tDWebBent;
// zoobenthos [g/m2/day]
dIMS = tDAbioIMS;
// inert matter in sediment [g/m2/day]
dDetS = tDAbioDetS + tDPrimDetS + tDWebDetS + tDBedDetS;
// sediment detritus [g/m2/day]

// mass-balance check
// -----
tDTotSys = (dDIMW + dDetW + dDiatW + dGreenW + dBleueW + dZoo) * aDepthW +
dFish + dPisc + dVeg + dDiatS + dGreenS + dBleueS + dBent + dIMS + dDetS;
// total change of dry-weight in the system [gDW/m2/day]
tDTotIn = tDPrimIn + tDWebIn + tDBedIn + tDAbioIn + uLoadDet;
// total flux of dry-weight into the system [gDW/m2/day]
tDErr = tDTotSys - tDTotIn;
// error in mass-balance [gDW/m2/day]

// phosphorus adsorption in sediment with Langmuir-isotherms using Clausen method for 'fast' processes
// -----
// adsorption isotherms (Langmuir)
// -----
aPisoIMS = kdPAdsIMS * oP04S / (1.0 + kdPAdsIMS * oP04S / uRelPAdsMaxIMS);
// P adsorption isotherm (Langmuir) onto inorganic matter in sediment [gP/gDW]
aPisoDetS = kdPAdsDetS * oP04S / (1.0 + kdPAdsDetS * oP04S / uRelPAdsMaxDetS);
// P adsorption isotherm (Langmuir) onto detritus in sediment [gP/gDW]

// derivatives of adsorption isotherms
// -----
aPisoDerivIMS = uRelPAdsMaxIMS * (uRelPAdsMaxIMS / kdPAdsIMS) / (kdPAdsIMS + oP04S)^2;
// [m3/gDW]
aPisoDerivDetS = uRelPAdsMaxDetS * (uRelPAdsMaxDetS / kdPAdsDetS) / (uRelPAdsMaxDetS + oP04S)^2;
// [m3/gDW]

// sum of 'slow' processes
// -----
tPSlowP04S = tPAbioP04S + tPPrimP04S + tPWebP04S + tPBedP04S;
// pore water SRP [gP/m2/day]
tPSlowAdsIMS = tPAbioAdsIMS;
// P-adsorbed onto IM in sediment [gP/m2/day]
tPSlowAdsDetS = tPAbioAdsDetS + tPWebAdsDetS;
// P-adsorbed onto detritus in sediment [gP/m2/day]

oDDetS = sDDetS / aDepthS / fPorSed;
// [gD.m-3w]
oDIMS = sDIMS / aDepthS / fPorSed;
// [gD.m-3w]
wPSlowP04S = tPSlowP04S / aDepthS / fPorSed;
// [gP.m-3w.d-1]
wPSlowAdsIMS = tPSlowAdsIMS / aDepthS / fPorSed;
// [gP.m-3w.d-1]
wPSlowAdsDetS = tPSlowAdsDetS / aDepthS / fPorSed;
// [gP.m-3w.d-1]
wDDetS = oDDetS / aDepthS / fPorSed;
// [gD.m-3w.d-1]
wDIMS = oDIMS / aDepthS / fPorSed;
// [gD.m-3w.d-1]

xB = aPisoDerivDetS * oDDetS;
xA = 1 + xB;
xC = aPisoDerivIMS * oDIMS;
xD = 1 + xC;
xE = xB * wPSlowP04S - wPSlowAdsDetS + aPisoDetS * wDDetS;
xF = xC * wPSlowP04S - wPSlowAdsIMS + aPisoIMS * wDIMS;
aDeterm = xA * xD - xB * xC;
// determinant in Cramer's rule

// phosphorus adsorption
// -----
wPSorpIMS = (xA * xF - xE * xC) / aDeterm;
// P sorption onto inert organic matter in sediment [gP/m3/d]
wPSorpDetS = (xE * xD - xB * xF) / aDeterm;
// P sorption onto detritus in sediment [gP/m3/d]

// phosphorus derivatives
// -----
dPDiatW = wPPrimDiatW + wPWebDiatW;
// diatoms [mgP/1/day]
dPGreenW = wPPrimGreenW + wPWebGreenW;
// greens [mgP/1/day]
dPBleueW = wPPrimBleueW + wPWebBleueW;
// blue-greens [mgP/1/day]
dP04W = wPAbioP04W + wPPrimP04W + wPWebP04W + uPLoadP04 / aDepthW;
// SRP in water [mgP/1/day]
dPAdsIMW = wPAbioAdsIMW;
// P-adsorbed onto IM in water [mgP/1/day]
dPAdsDetW = wPAbioAdsDetW + wPWebAdsDetW;

```

```

// P-adsorbed onto detritus in water [mgP/l/day]
dPDetW = wPAbioDetW + wPPrinDetW + wPWebDetW + wPBedDetW + uPLoadDet / aDepthW;
// detritus [mgP/l/day]

dPZoo = wPWebZoo;
// Herbivorous zooplankton [mgP/l/day]
dPFish = tPWefFish;
// Fish [gP/m2/day]
dPPisc = tPWepPisc;
// predatory fish [gP/m2/day]

dPVeg = tPBedVeg + tPWebVeg;
// submerged vegetation [gP/m2/day]
dPDiatS = tPPrinDiatS + tPWebDiatS;
// Bottom diatoms [gP/m2/day]
dPGreenS = tPPrinGreenS + tPWebGreenS;
// Bottom Green algae [gP/m2/day]
dPBlueS = tPPrinBlueS + tPWebBlueS;
// Bottom blue-greens [gP/m2/day]
dPBent = tPWebBent;
// zoobenthos P [gP/m2/day]
dPO4S = tPSlowPO4S - (wPSorpIMS + wPSorpDetS) * aDepthS * fPorSed;
// pore water SRP [gP/m2/day] {modified on 15-12-97}
dPAdsIMS = tPSlowAdsIMS + wPSorpIMS * aDepthS * fPorSed;
// P-adsorbed onto IM in sediment [gP/m2/day] {modified on 15-12-97}
dPAdsDetS = tPSlowAdsDetS + wPSorpDetS * aDepthS * fPorSed;
// P-adsorbed onto detritus in sediment [gP/m2/day] {modified on 15-12-97}
dPDetS = tPAbioDetS + tPPrinDetS + tPWebDetS + tPBedDetS;
// sediment detritus P [gP/m2/day]

// mass-balance check
// -----
tPTotSys = (dPO4W + dPAdsIMW + dPAdsDetW + dPDetW + dPDiatW + dPGreenW + dPBlueW
+ dPZoo) * aDepthW + dPFish + dPPisc + dPVeg + dPDiatS + dPGreenS + dPBlueS +
dPBent + dPO4S + dPAdsIMS + dPAdsDetS + dPDetS;
// total change of phosphorus in the system [gP/m2/day]
tPTotIn = tPWebIn + tPBedIn + tPAbioIn + uPLoadDet + uPLoadPO4;
// total flux of phosphorus into the system [gP/m2/day]
tPErr = tPTotSys - tPTotIn;
// error in phosphorus mass-balance [gP/m2/day]

// nitrogen derivatives
// -----
dNDiatW = wNPrinDiatW + wNWebDiatW;
// diatoms [mgN/l/day]
dNGreenW = wNPrinGreenW + wNWebGreenW;
// greens [mgN/l/day]
dNBlueW = wNPrinBlueW + wNWebBlueW;
// blue-greens [mgN/l/day]
dNH4W = wNAbioNH4W + wNPrinNH4W + wNWebNH4W + wNBedNH4W + uNLoadNH4 / aDepthW;
// ammonium in water [mgN/l/day]
dNO3W = wNAbioNO3W + wNPrinNO3W + wNWebNO3W + wNBedNO3W + uNLoadNO3 / aDepthW;
// nitrate in water [mgN/l/day]
dNDetW = wNAbioDetW + wNPrinDetW + wNWebDetW + wNBedDetW + uNLoadDet / aDepthW;
// detritus [mgN/l/day]

dNZoo = wNWebZoo;
// Herbivorous zooplankton [mgN/l/day]
dNFish = tNWebFish;
// whitefish [gN/m2/day]
dNPisc = tNWebPisc;
// predatory fish [gN/m2/day]

dNVeg = tNBedVeg + tNWebVeg;
// submerged vegetation [gN/m2/day]
dNDiatS = tNPrinDiatS + tNWebDiatS;
// Bottom diatoms [gN/m2/day]
dNGreenS = tNPrinGreenS + tNWebGreenS;
// Bottom Green algae [gN/m2/day]
dNBlueS = tNPrinBlueS + tNWebBlueS;
// Bottom blue-greens [gN/m2/day]
dNBent = tNWebBent;
// zoobenthos N [gN/m2/day]
dNH4S = tNAbioNH4S + tNPrinNH4S + tNWebNH4S + tNBedNH4S;
// pore water ammonium [gN/m2/day]
dNO3S = tNAbioNO3S + tNPrinNO3S + tNWebNO3S + tNBedNO3S;
// pore water nitrate [gN/m2/day]
dNDetS = tNAbioDetS + tNPrinDetS + tNWebDetS + tNBedDetS;
// sediment detritus N [gN/m2/day]

// mass-balance check
// -----
tNTotSys = (dNH4W + dNO3W + dNDetW + dNDiatW + dNGreenW + dNBlueW + dNZoo) *
aDepthW + dNFish + dNPisc + dNVeg + dNDiatS + dNGreenS + dNBlueS + dNBent + dNH4S
+ dNO3S + dNDetS;
// total change of nitrogen in the system [gN/m2/day]
tNTotIn = tNPrinIn + tNWebIn + tNBedIn + tNAbioIn + uNLoadDet + uNLoadNH4 + uNLo-
adNO3;
// total flux of nitrogen to the system [gN/m2/day]
tNErr = tNTotSys - tNTotIn;
// error in nitrogen mass-balance [gN/m2/day]

// silica derivatives
// -----
dSiO2W = wSiAbioSiO2W + wSiPrinSiO2W;
// dissolved silica in water [mgSi/l/day]
dSiDetW = wSiAbioDetW + wSiPrinDetW + wSiWebDetW + uSiLoadDet / aDepthW;
// detritus [mgSi/l/day]
dSiDetS = tSiAbioDetS + tSiPrinDetS + tSiWebDetS;
// sediment detritus Si [gSi/m2/day]

// mass-balance check
// -----
tSiTotSys = (dSiO2W + dSiDetW + wSiPrinDiatW + wSiWebDiatW) * aDepthW + tSiPrin-
DiatS + tSiWebDiatS + dSiDetS;
// total change of silica in the system [gSi/m2/day]
tSiTotIn = tSiAbioIn + uSiLoadDet;
// total flux of silica to the system [gSi/m2/day]
tSiErr = tSiTotSys - tSiTotIn;
// error in silica mass-balance [gSi/m2/day]

// year number derivatives
// -----
IF (Time - YearNumber * DaysPerYear >= DaysPerYear)

```

```

{dYearNumber = 1.0 * aCorStep;}
ELSE {dYearNumber = 0.0;}
// END IF
// number of years passed [-]

// integration calls
// -----
// dry weight states
// -----
kO(sDDiatW) = dDDiatW;
// diatoms [mg/l/day]
kO(sDGreenW) = dDGreenW;
// greens [mg/l/day]
kO(sDBlueW) = dDBlueW;
// blue-greens [mg/l/day]
kO(sDIMW) = dDIMW;
// inert matter in water [mg/l/day]
kO(sDDetW) = dDDetW;
// detritus [mg/l/day]

kO(sDZoo) = dDZoo;
// Herbivorous zooplankton [mg/l/day]
kO(sDFish) = dDFish;
// Fish [g/m2/day]
kO(sDPisc) = dDPisc;
// predatory fish [g/m2/day]

kO(sDVeg) = dDVeg;
// submerged vegetation [g/m2/day]
kO(sDDiatS) = dDDiatS;
// diatoms on sediment [g/m2/day]
kO(sDGreenS) = dDGreenS;
// greens on sediment [g/m2/day]
kO(sDBlueS) = dDBlueS;
// blue-greens on sediment [g/m2/day]
kO(sDBent) = dDBent;
// zoobenthos [g/m2/day]
kO(sDIMS) = dDIMS;
// inert matter in sediment [g/m2/day]
kO(sDDetS) = dDDetS;
// sediment detritus [g/m2/day]

// phosphate states
// -----
kO(sPDiatW) = dPDiatW;
// diatoms [mgP/l/day]
kO(sPGreenW) = dPGreenW;
// greens [mgP/l/day]
kO(sPBlueW) = dPBlueW;
// blue-greens [mgP/l/day]
kO(sPO4W) = dPO4W;
// SRP in water [mgP/l/day]
kO(sPAdsIMW) = dPAdsIMW + oPAdsIMW0 * aCorStep;
// P-adsorbed onto IM in water [mgP/l/day]
kO(sPAdsDetW) = dPAdsDetW + oPAdsDetW0 * aCorStep;
// P-adsorbed onto detritus in water [mgP/l/day]
kO(sPDetW) = dPDetW;
// detritus [mgP/l/day]

kO(sPZoo) = dPZoo;
// Herbivorous zooplankton [mgP/l/day]
kO(sPFish) = dPFish;
// Fish [gP/m2/day]
kO(sPPisc) = dPPisc;
// predatory fish [gP/m2/day]

kO(sPVeg) = dPVeg;
// submerged vegetation [gP/m2/day]
kO(sPDiatS) = dPDiatS;
// diatoms on sediment [gP/m2/day]
kO(sPGreenS) = dPGreenS;
// greens on sediment [gP/m2/day]
kO(sPBlueS) = dPBlueS;
// blue-greens on sediment [gP/m2/day]
kO(sPBent) = dPBent;
// zoobenthos P [gP/m2/day]
kO(sPO4S) = dPO4S;
// pore water P [gP/m2/day]
kO(sPAdsIMS) = dPAdsIMS + aPAdsIMS0 * aCorStep;
// P-adsorbed onto IM in sediment [gP/m2/day]
kO(sPAdsDetS) = dPAdsDetS + aPAdsDetS0 * aCorStep;
// P-adsorbed onto detritus in sediment [gP/m2/day]
kO(sPDetS) = dPDetS;
// sediment P [gP/m2/day]

// nitrogen states
// -----
kO(sNDiatW) = dNDiatW;
// diatoms [mgN/l/day]
kO(sNGreenW) = dNGreenW;
// greens [mgN/l/day]
kO(sNBlueW) = dNBlueW;
// blue-greens [mgN/l/day]
kO(sNH4W) = dNH4W;
// ammonium [mgN/l/day]
kO(sNO3W) = dNO3W;
// nitrate [mgN/l/day]
kO(sNDetW) = dNDetW;
// detritus [mgN/l/day]

kO(sNZoo) = dNZoo;
// Herbivorous zooplankton [mgN/l/day]
kO(sNFish) = dNFish;
// Fish [gN/m2/day]
kO(sNPisc) = dNPisc;
// predatory fish [gN/m2/day]

kO(sNVeg) = dNVeg;
// submerged vegetation [gN/m2/day]
kO(sNDiatS) = dNDiatS;
// diatoms [gN/m2/day]
kO(sNGreenS) = dNGreenS;

```



```

// greens [gN/m2/day]
k0(sNBlueS) = dNBlueS;
// blue-greens [gN/m2/day]
k0(sNBent) = dNBent;
// zoobenthos N [gN/m2/day]
k0(sNH4S) = dNH4S;
// ammonium [gN/m2/day]
k0(sNO3S) = dNO3S;
// nitrate [gN/m2/day]
k0(sNDetS) = dNDetS;
// detritus [gN/m2/day]

// silica states
//-----
k0(sSiO2W) = dSiO2W;
// dissolved silica in water [mgSi/l/day]
k0(sSiDetW) = dSiDetW;
// water detritus [mgSi/l/day]
k0(sSiDetS) = dSiDetS;
// sediment detritus [gSi/m2/day]

// initiation check P adsorption
//-----
k0(PAdsInit) = dPAdsInit * aCorStep;
// initiation check P adsorption [*]

// time states
//-----
k0(Time) = dTime;
// time [days/day]
k0(YearNumber) = dYearNumber;
// year number [*]
}

// NOMENCLATURE of parameters and variables
//-----
- State variables:
s + element (+ adsorbed) + compartment + layer (+ 0)
(state) (D/P/N/Si/X) {(-Ads) (IM/Det/PO4/NO3/etc.) (W/S) (-/IC)}

- Processes (fluxes):
t/w + element + process (+ adsorbed) + compartment + layer
(flux) (D/P/N/Si/X) {Set/Min/etc.} {(-Ads) (IM/Det/PO4/NO3/etc.) (W/S)}

Substances, elements:
D- = dry weight
P- = phosphorus
N- = nitrogen
Si- = silica

L- = light
Tm = temperature
Chla, Ch- = chlorophyll-a

Layers:
-W = water
-S = (upper) sediment
-T = total

Components:
Det = detritus, IM = inorganic (inert) matter,
PO4 = phosphate, NH4 = ammonium, NO3 = nitrate,
-Diss = (total) dissolved,
-AdsDet = adsorbed onto detritus,
-AdsIM = adsorbed onto inorganic matter

-Phyt = phytoplankton, OM = total organic matter,

-Zoo = zooplankton
-Fish = whitefish
-Pisc = predatory fish
-Bent = zoobenthos
-Tot = total

-Veg = vegetation

Processes:
Load = external loading
Dil = dilution
Ev = evaporation
Inf = infiltration (downward)
Seep = seepage (upward)
Set = settling, sedimentation
Resus = resuspension
Bur = burial
Dif = diffusion
Nitr = nitrification
Denit = denitrification
Sorp = ad-/desorption
Min = mineralization
Upt = uptake (of nutrients)
Ass = assimilation
Prod = production
Cons = consumption
Eges = egestion
Resp = respiration (DW)
Excr = excretion (nutrients)
Graz = grazing
Pred = predation
Mort = natural mortality
Loss = (other) loss
Harv = harvesting

Abio = total flux from abiotic module
Prim = total flux from algae module
Bed = total flux from vegetation module
Web = total flux from food web module

Prefixes:
Note: combinations are possible.
s- = state variable
s...0 = initial value of state variable
d- = derivative

```

```

// t- = transfer (flux, process) per area [g/m2/d]
// w- = flux (transfer, process) per volume of water [g/m3/d]
// r- = (dynamical) ratio [gA/gB]
// o- = concentration [mg/l]
// a- = other auxiliary
// c- = constant (general)
// k- = rate constant [1/day]
// h- = half-saturation constant
// f- = fraction [-]
// m- = measurement, read variable
// u- = derived input variable
// i-, j- = counters (integers)
// n- = numbers (integers)
// kd- = partitioning coefficient (used in sorption equations)
//      [(gX/gDW) / (gX/m3)] = [m3/g]
// eq- = equilibrium (used in sorption equations)
// Rel- = relative ("per")

Suffixes:
-Max = maximum
-Min = minimum
-In, -in = incoming
-Bot = bottom
-Ex = external
-mg = in milligrammes
-Sp = specific ("per unit of biomass")

Other abbreviations:
-Fun- = function, dependence
-Ext- = extinction
-Carr- = carrying capacity, maximum biomass [gDW/m2 or gDW/m3]
-Cor- = corrected, modified
-Velo- = velocity [m/day]
-Mu- = growth rate [1/day]

```