

# Operationalisering van het water- kwaliteitsmodel Schelde-estuarium

Uitbreiding procesformuleringen met denitrificatie waterkolom

P.M.A. Boderie en M.R.L. Ouboter



# Inhoud

<b>1</b>	<b>Inleiding</b> .....	<b>1 – 1</b>
<b>2</b>	<b>Uitbreiding formuleringen</b> .....	<b>2 – 1</b>
	2.1 Achtergrond denitrificatie (situatie SAWES-model) .....	2 – 1
	2.2 Uitbreiding denitrificatieformuleringen .....	2 – 1
	2.3 Wijziging overige formuleringen .....	2 – 4
<b>3</b>	<b>Resultaten</b> .....	<b>3 – 1</b>
	3.1 Resultaten van de gevoeligheidsanalyse .....	3 – 1
	3.2 Resultaten van de automatische calibratie .....	3 – 2
	3.2.1 Concentratie profielen van de 'beste fit' .....	3 – 2
	3.2.2 Parametercombinaties uit de 'vase' .....	3 – 5
	3.2.3 Balansen .....	3 – 6
<b>4</b>	<b>Conclusies en aanbevelingen</b> .....	<b>4 – 1</b>
<b>5</b>	<b>Literatuur</b> .....	<b>5 – 1</b>

## Bijlage A

Parametercombinaties voor 50 berekeningen in de 'vase' met de daaruit berekende nitrificatie- en denitrificatiesnelheid bij een zuurstofconcentratie van 1 mg/l

## Figuren

# 1 Inleiding

In 1991 heeft WL in opdracht van en in samenwerking met Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, in het kader van het project SAWES (Systeem Analyse WESTerschelde) het waterkwaliteitsmodel van het Schelde-estuarium opgeleverd (WL, 1991). In 1992 is in het kader van het OPERAWES-project het SAWES-model gekoppeld aan het programmapakket SENECA (WL, 1992), dat ontwikkeld is door het toenmalige DIHO (nu CBMO) in opdracht van Rijkswaterstaat. Daarmee is een stap gezet in de richting van een verdergaande operationalisering van het SAWES-waterkwaliteitsmodel tot een bruikbaar hulpmiddel waarmee analyses kunnen worden uitgevoerd ten behoeve van beleidsvoorbereiding en -advisering.

Mede naar aanleiding van aanbevelingen voor nader onderzoek gedaan in het rapport over het SAWES-waterkwaliteitsmodel zijn ideeën ontstaan over een adequatere beschrijving van het denitrificatie-proces in het Schelde-estuarium. Juist omdat in verband met beleidsanalyse de denitrificatie als belangrijkste stikstofverwijderingsproces van belang is, is aanpassing van de formulering gewenst.

Implementatie van de verbeterde denitrificatieformuleringen stelt ons in staat om conclusies aangaande het belang van stikstofverwijdering in het estuarium te vergelijken met de conclusies van Billen van de Vrije Universiteit te Brussel (Billen, 1978A; 1990). Het doel van de uitbreiding van het SAWES-instrumentarium met een denitrificatieformulering in de waterfase is tweeledig.

- Ten eerste wordt het als onbevredigend ervaren dat het denitrificatieproces dat onder anoxische omstandigheden in de waterkolom in het veld gemeten wordt (Billen, 1978A) niet in het model geïmplementeerd is.
- Ten tweede bestaat er een discrepantie tussen de modelberekeningen en de gemeten nitraatconcentraties, met name in de bovenstroomse vakken van het model.

Via opdrachtbon KKWS922790 van 2 november 1992 gaf DGW in de persoon van drs B.J. Kater opdracht om het denitrificatie-proces in de waterkolom in het SAWES-model te implementeren en een voorlopige calibratie uit te voeren. In het voorliggende rapport worden de geïmplementeerde modelformuleringen beschreven en wordt het modelsysteem geëvalueerd. De financiële middelen werden beschikbaar gesteld via het DGW-project WSV '94.

De werkzaamheden en rapportage zijn uitgevoerd door J.K.L. van Beek, drs M.R.L. Ouboter en ir P.M.A. Boderie van het Waterloopkundig Laboratorium. Interne kwaliteitscontrole van het eindrapport werd verricht door drs N.M. De Rooij.

Het gebruik van begrippen zoals modelnamen, namen van koppelingen, projecten en andere specifieke termen is zo consequent mogelijk gehanteerd conform de gedefinieerde 'begrip-lijst' en de 'lijst met specifieke SENECA-termen' (WL, 1992).

In hoofdstuk twee is de verbeterde denitrificatieformulering (samen met de eveneens verbeterde formulering voor de zuurstoffunctie voor nitrificatie) beschreven. In hoofdstuk drie zijn de resultaten van de gevoeligheidsanalyse en automatische calibratie te vinden. Conclusies tenslotte zijn opgenomen in hoofdstuk vier.

## 2 Uitbreiding formuleringen

### 2.1 Achtergrond denitrificatie (situatie SAWES-model)

In het SAWES-waterkwaliteitsmodel (WL, 1991 en 1992) is onder andere de stikstofcyclus opgenomen. In deze cyclus vindt een denitrificatiereactie plaats, waarbij stikstof uit het systeem verdwijnt door de omzetting van nitraat in stikstofgas. De denitrificatiereactie vindt normaal gesproken plaats onder anoxysche omstandigheden, meestal in de waterbodem (Payne, 1973; Seitzinger, 1988). In de bovenloop van het Schelde-estuarium is, vooral in de zomer, sprake van zuurstofloosheid zodat de denitrificatiereactie daar ook in de waterfase kan plaatsvinden. Het optreden van denitrificatie in de waterkolom onder anoxysche omstandigheden is niet afzonderlijk in de procesformuleringen van dit model opgenomen. De denitrificatie in het model is beschreven met één procesformulering. Bij de calibratie is een waarde van de denitrificatieconstante ingesteld die optimaal zowel de denitrificatie in de waterkolom in de bovenloop (vanaf Rupelmonde zeewaarts) als de denitrificatie in de waterbodem in het hele modelgebied beschrijft.

### 2.2 Uitbreiding denitrificatieformuleringen

Denitrificatie is een anoxysch proces dat kan optreden in de waterkolom als de zuurstofconcentratie laag is. In de (water)bodem vindt het proces reeds op zeer geringe diepte plaats ten gevolge van anoxysche omstandigheden aldaar. We onderscheiden daarom twee denitrificatieprocessen: water- en bodemdenitrificatie. De formulering voor de bodemdenitrificatie is identiek aan de formulering die gebruikt is in zowel SAWES (WL, 1991) als in OPERAWES (WL, 1992). De formulering voor denitrificatie in de waterkolom is nieuw en de denitrificatieflux is behalve van de nitraatconcentratie en de temperatuur ook afhankelijk van de zuurstofconcentratie in het water. De literatuur biedt geen eenduidige zuurstofconcentratie tot welke denitrificatie plaatsvindt: waarden tussen 0 en 3 mg O<sub>2</sub>.L<sup>-1</sup> worden gevonden (Billen, 1978B; Jorgensen, 1984). Wij hebben daarom de kritische zuurstofconcentratie voor denitrificatie in de waterfase als variabele in het model gebracht. Belangrijk om op te merken is dat de zuurstofconcentratie in het model een kolomgemiddelde waarde vertegenwoordigt.

Beide denitrificatie formuleringen zijn als volgt geïmplementeerd:

### Bodemdenitrificatie

$$\frac{\partial(NO_3^-)}{\partial t} = -RC_{B DEN} \cdot \frac{(NO_3^-)}{H} \cdot f(T) \cdot g_N(O_2)$$

$$f(T) = a^{T-20} \tag{2.1}$$

$$g_N(O_2) = \frac{O_2 + \infty}{10 + \infty}$$

waarin:

$NO_3^-$	=	nitraatconcentratie in waterkolom	(mg.L <sup>-1</sup> )
$RC_{B DEN}$	=	denitrificatie snelheid	(m.d <sup>-1</sup> )
H	=	gemiddelde waterdiepte	(m)
f(T)	=	standaard temperatuurfunctie	(-)
a	=	constante in de temperatuurfunctie	(-)
$g_N(O_2)$	=	zuurstoffunctie denitrificatie (waarde 0 tot 1)	(-)
$\infty$	=	constante die mede de waarde van de functie bij zuurstofloosheid bepaalt	(-)
10	=	zuurstofconcentratie waarbij de functie waarde 1.0 heeft	(mgO <sub>2</sub> .L <sup>-1</sup> )

Notabene:

de formulering voor bodemdenitrificatie is identiek aan de formulering zoals in SAWES (WL, 1991) en OPERAWES (WL, 1992). De zuurstoffunctie ( $g_N(O_2)$ ) heeft in genoemde studies altijd de waarde 1 gehad. Ook in de huidige studie is dat het geval. Een argument om de zuurstoffunctie af te laten wijken van 1 is dat het transport van nitraat de bodem in afhankelijk is van de nitraatgradiënt, en daarmee van de dikte van de oxysche toplaag. Bij een lage zuurstofconcentratie in de waterkolom is de bodemdenitrificatie groter.

### Denitrificatie in de waterkolom

$$\frac{\partial(\text{NO}_3^-)}{\partial t} = -RC_{\text{WDEN}} \cdot (\text{NO}_3^-) \cdot f(T) \cdot g_N(\text{O}_2)$$

$$f(T) = a^{(T-20)}$$

$$g_N(\text{O}_2) = 0 \quad \text{if } \text{O}_2 \geq \text{Croxde} \quad (2.2)$$

$$= \frac{(1 - \text{O}_2 / \text{Croxde})}{(1 + kf' \cdot \text{O}_2 / \text{Croxde})} \quad \text{if } \text{O}_2 < \text{croxde}$$

$$kf' = 2.7 + \exp(kf)$$

waarin:

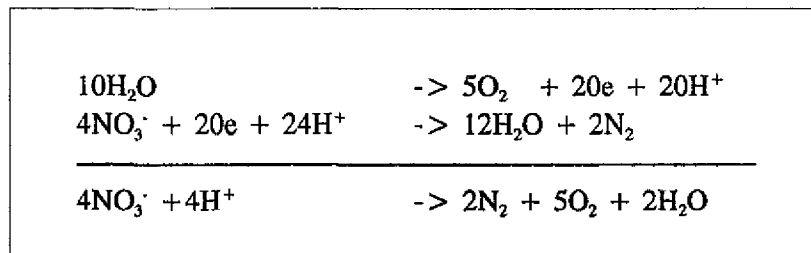
$\text{NO}_3^-$	=	nitraatconcentratie	( $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ )
$RC_{\text{WDEN}}$	=	denitrificatiesnelheid in de waterkolom	( $\text{d}^{-1}$ )
$f(T)$	=	standaard temperatuurfunctie	(-)
$a$	=	constante in de temperatuurfunctie	(-)
$g_N(\text{O}_2)$	=	zuurstoffunctie denitrificatie (waarde 0 tot 1)	(-)
$\text{croxde}$	=	kolongemiddelde kritische zuurstofconcentratie waaronder denitrificatie plaatsvindt	( $\text{mgO}_2 \cdot \text{L}^{-1}$ )
$kf$	=	kromming waarmee de zuurstoffunctie van 1 naar 0 afneemt (zie Figuur 1). De expressie in $kf'$ is toegepast om een linearisatie te benaderen ten behoeve van de exercities in SENECA	(-)

In vergelijking 1.2 is aangenomen dat denitrificatie in de waterkolom altijd plaatsvindt als de zuurstofconcentratie lager is dan de kolongemiddelde kritische zuurstofconcentratie voor denitrificatie (croxde). Het verloop van de functie tussen zuurstofconcentratie is 0 en croxde wordt bepaald door de krommingsfactor  $kf$  ( $1 < kf < 4$ ), zie Figuur 1. Een gelijkvormig verloop van de zuurstofafhankelijkheid wordt door Billen (1978B) experimenteel gevonden.

In het SAWES-model zijn bodemprocessen niet expliciet gemodelleerd. Een proces zoals zuurstofvraag van de bodem is gelumpt met de zuurstofvraag in de waterkolom. Het optreden van denitrificatie in de bodem is o.a. afhankelijk van de nitraatconcentratie in de waterkolom en heeft invloed op de modelvariabelen  $\text{NO}_3^-$  en pH (zie Tabel 2.2).

Denitrificatie in de waterkolom verwijdert  $\text{HNO}_3$  en levert oxydator ( $\text{O}_2$ , Tabel 2.1). In SAWES wordt de oxydatie-toestand beschreven met  $\text{O}_2$  en equivalente hoeveelheden reductor als  $\text{O}_2$  negatief wordt (zuurstofschuld, modelvariabele RES2). Deze zuurstofschuld treedt op doordat zuurstofconsumerende processen als de afbraak van organische stof (BOD) en nitrificatie doorgaan als de kolongemiddelde zuurstofconcentratie gelijk is aan nul.

Door denitrificatie in de waterkolom te modelleren (Tabel 2.1) wordt een deel van de 'zuurstofschuld' expliciet verhaald op een terminale electronacceptor (nitraat). De verbruikte nitraatequivalenten verminderen derhalve de 'zuurstofschuld' en worden in Tabel 2.2 als productie van zuurstof opgevoerd.



Tabel 2.1 Halfreacties voor de produktie van zuurstofequivalenten als gevolg van denitrificatie in de waterkolom

Proces	$\text{NO}_3^-$	$\text{NH}_4^+$	$\text{H}^+$	$\text{O}_2$	BO D	$\text{CO}_2$
denitrificatie bodem	-1	0	-1	0	0	0
denitrificatie water	-1	0	-1	+1.25	0	0
nitrificatie	1	-1	+2	-2	0	0
BOD-afbraak	0	0	0	-1	-1	1.375

Tabel 2.2 Stoichiometrie van beide denitrificatieprocessen, BOD-afbraak en nitrificatie op modelvariabelen in de waterkolom ( $\text{mol.mol}^{-1}$ )

## 2.3 Wijziging overige formuleringen

Omdat de nieuwe zuurstoffunctie voor denitrificatie (Eq. 2.2, Figuur 1) afwijkt van de zuurstoffuncties voor nitrificatie, BOD-afbraak en BODN afbraak (WL, 1991) zijn deze door meer vergelijkbare functies (met kromming) vervangen (Eq. 2.4, 2.5 en Figuur 2). De overige formuleringen zijn ten opzichte van SAWES en OPERAWES niet gewijzigd. De volgende processen zijn betrokken bij de uitgevoerde automatische calibratie (zie paragraaf 3).

### Reaëratie

$$\frac{\partial O_2}{\partial t} = \frac{K_L}{H} (O_{2,\text{sat}} - O_2) \quad (2.3)$$

waarin:

H	= gemiddelde waterdiepte	(m)
$K_L$	= reaëratiecoëfficiënt	( $\text{m.d}^{-1}$ )
t	= tijd	(d)
$O_{2,\text{sat}}$	= verzadigingsconcentratie zuurstof, een functie van temperatuur en chloride concentratie (WL, 1991)	( $\text{mg.L}^{-1}$ )
$O_2$	= kolomgemiddelde zuurstofconcentratie	( $\text{mg.L}^{-1}$ )

**Nitrificatie:**

$$\frac{\partial(NH_4^+)}{\partial t} = -RC_{NIT} \cdot (NH_4^+) \cdot f(T) \cdot g_N(O_2)$$

$$f(T) = a^{(T-20)}$$

$$g_N(O_2) = (1 - F_{NIT}) \cdot \left(\frac{O_2}{10}\right)^{10^{g_{NIT}}} + F_{NIT} \quad (2.4)$$

waarin:

$NH_{4+}$	= ammoniumconcentratie	(mg.L <sup>-1</sup> )
$RC_{NIT}$	= nitrificatiesnelheid	(d <sup>-1</sup> )
$f(T)$	= standaard temperatuurfunctie	(-)
$a$	= constante in de temperatuurfunctie	(-)
$g_N(O_2)$	= zuurstoffunctie nitrificatie	(-)
10	= zuurstofconcentratie waarbij de functie waarde 1.0 heeft	(mgO <sub>2</sub> .L <sup>-1</sup> )
$F_{NIT}$	= functiewaarde in zuurstofloze toestand	(-)
$G_{NIT}$	= krommingsfactor voor zuurstoffunctie, rechte lijn als $G_{NIT} = 0$ , maximale kromming bij $G_{NIT} = -1$	(-)

**BOD-afbraak**

$$\frac{\partial(BOD)}{\partial t} = -RC_{BOD} \cdot (BOD) \cdot f(T) \cdot g_B(O_2)$$

$$f(T) = a^{(T-20)} \quad (2.5)$$

$$g_B(O_2) = (1 - F_{BOD}) \cdot \left(\frac{O_2}{10}\right)^{10^{g_{BOD}}} + F_{BOD}$$

waarin:

BOD	= concentratie BOD	(mg.L <sup>-1</sup> )
$RC_{BOD}$	= afbraaksnelheid BOD	(d <sup>-1</sup> )
$f(T)$	= standaard temperatuurfunctie	(-)
T	= temperatuur	(°C)
$a$	= constante in de temperatuurfunctie	(-)
$g_B(O_2)$	= zuurstoffunctie voor BOD afbraak	(-)
10	= zuurstofconcentratie waarbij de functie waarde 1.0 heeft	(mgO <sub>2</sub> .L <sup>-1</sup> )
$F_{BOD}$	= functiewaarde in zuurstofloze toestand	(-)
$G_{BOD}$	= krommingsfactor voor zuurstoffunctie, rechte lijn als $G_{BOD} = 0$ , maximale kromming bij $G_{BOD} = -1$	(-)

**Mineralisatie organisch stikstof (BODN-afbraak):**

Formulering analoog aan formule 1.5 waarbij de afbraak snelheid van organisch stikstof de naam  $RC_{BODN}$  heeft.



## 3 Resultaten

### 3.1 Resultaten van de gevoeligheidsanalyse

Alvorens een automatische calibratie met SENECA uit te voeren is een aantal berekeningen gemaakt om de gevoeligheid van de modeluitkomsten voor de nieuwe formuleringen en de daarin gebruikte parameters te krijgen. Hiervoor is geen gebruik gemaakt van de 'sensitivity' optie die SENECA biedt.

Ten eerste werd een berekening gemaakt waarin naast de oude formulering voor bodemdenitrificatie (parameters identiek aan Run 125) extra denitrificatie in de waterfase plaatsvond ( $RC_{DNB} = 0.07 \text{ d}^{-1}$ ,  $RC_{DNW} = 0.3 \text{ d}^{-1}$ ,  $croxde = 2 \text{ mg.l}^{-1}$  en  $kf = 3$ ). Volgens verwachting (Figuur 3) is de nitraatconcentratie (ten opzichte van de SAWES-calibratieberekening, Run125 (WL, 1991)) lager in de zomer wanneer zuurstof beneden de kritische grens van  $2 \text{ mg.l}^{-1}$  komt en nitrificatie in de waterkolom plaatsvindt (modelsegmenten 1 t/m 5). In de winter is er geen verschil (niet gepresenteerd). Volgens Tabel 2.2 wordt bij denitrificatie in de waterkolom een productie van zuurstof en een consumptie van zuur (hogere pH). Het effect van zuurstofproductie leidt tot hogere berekende kolomgemiddelde zuurstofconcentraties<sup>1</sup>. De in Figuur 3 gepresenteerde resultaten geven aan dat de reductie van de nitraatconcentratie dáár plaatsvindt waar in Run125 gemodelleerd nitraat te hoog is. Het is ook duidelijk dat de bodemdenitrificatie te hoog is (in deze berekening heeft  $RC_{DNB}$  nog de 'gelumpte' waarde uit SAWES) en naar beneden bijgesteld moet worden. Het effect van de denitrificatie in de waterkolom pakt in juli slecht en in augustus goed uit ten opzichte van de zuurstof metingen.

Vervolgens is in bovenbeschreven berekening de bodemdenitrificatie helemaal uitgezet ( $RC_{DNB} = 0.0$ ). Uit Figuur 4 blijkt dat de nitraatconcentratie in het winterhalfjaar dan alleen in het midden van het estuarium hoger wordt. In de bovenloop (modelsegmenten 1 t/m 5) is de zuurstofconcentratie zo laag ( $< 2 \text{ mg.L}^{-1}$ ) dat de denitrificatie in de waterkolom het gebrek aan bodemdenitrificatie kan compenseren. In de buurt van Vlissingen (modelsegmenten 13 en 14) is het (dispersief) transport vanuit zee (randconcentratie) zo groot dat het ontbreken van (zowel bodem- als water-) denitrificatie teniet gedaan wordt.

Verder is vermeldenswaard dat de gevoeligheid van het model voor verandering van de denitrificatiesnelheid in de waterfase zeer gering is: er bestaat nauwelijks verschil tussen een berekening met  $RC_{DNW} = 0.3$  of  $RC_{DNW} = 0.15 \text{ d}^{-1}$ . Verder blijkt dat bij een hoge krommingsfactor van de zuurstofformulering voor denitrificatie ( $kf$ ) het model ongevoelig is voor hoge waarden van  $croxde$ . Dit is begrijpelijk gezien het vlakke verloop van de zuurstoffunctie bij hoge waarden van  $kf$  (Figuur 2).

<sup>1</sup> De veronderstelling is dat denitrificatie in dat deel van de waterkolom plaatsvindt waar zuurstof het laagst is (zuurstofschuld, kolomgemiddeld is zuurstof aanwezig). In dit deel ledigt de denitrificatie een deel van de zuurstofschuld die door zuurstofconsumerende processen ontstaat. Hierdoor wordt de kolomgemiddelde zuurstofconcentratie hoger.

*Conclusie:* Het lijkt er op dat de formulering voor denitrificatie in de waterkolom voldoet aan de verwachtingen: ze heeft 's zomers een sterke invloed op de nitraatconcentraties in de bovenloop (modelsegmenten 1 t/m 5). Het model is met name gevoelig voor de krommingsfactor ( $k_f$ ) en in mindere mate voor de  $RC_{BDN}$  en  $croxde$ . Door het verloop van de zuurstoffunctie (Figuur 1) wordt denitrificatie in de waterkolom pas substantieel bij zuurstofconcentraties die (veel) lager zijn dan de waarde van  $croxde$ . Verbetering van de fit van de nitraatmetingen lijkt voor de zomermaanden mogelijk, op de modeluitkomst voor de winter (met name februari 1987, Figuur 3) heeft de formulering echter geen enkel effect.

## 3.2 Resultaten van de automatische calibratie

### 3.2.1 Concentratie profielen van de 'beste fit'

De automatische calibratie is uitgevoerd met behulp van SENECA. Er zijn 500 berekeningen uitgevoerd waarvan er 50 met de laagste GOF (dat wil zeggen de beste fit) bewaard werden in de 'vase'. Er werd op acht parameters gecalibreerd en de initieel opgegeven ranges staan vermeld in Tabel 3.1. Parameters die tijdens de automatische calibratie constant gehouden zijn staan in deze tabel in de kolom 'actueel'.

De keuze van de parameters is deels gebaseerd op de gevoeligheidsanalyse:  $croxde$  heeft een vaste waarde van  $3\text{mg.L}^{-1}$  gekregen (Billen, 1978<sup>B</sup>) en  $k_f$  en  $RC_{DNB}$  variëren. De waarde van  $croxde$  is relatief hoog maar het gaat hier om een kolomgemiddelde waarde. In de literatuur zijn overigens aanwijzingen te vinden dat denitrificatie ook onder nog hogere zuurstofconcentraties plaatsvindt (Lloyd et al, 1987). Deels is de keuze gebaseerd op resultaten uit OPERAWES (WL, 1992): derhalve varieert de kromming van de zuurstoffunctie voor nitrificatie ( $G_{NIT}$ ) bij een  $F_{NIT}$  die in OPERAWES bepaald is. De invloed van de temperatuur op de reactiesnelheden van de diverse processen is vooralsnog uit overwegingen van rekentijd niet meegenomen in de automatische calibratie ( $a_{NIT}$ ,  $a_{DNB}$  en  $a_{DNW}$ ).

Parameter	Symbol	Actueel <sup>1</sup>	Min	Max
1. reaëratiecoëfficiënt	$K_L$		0.9	1.3
2. nitrificatiesnelheid	$RC_{NIT}$		0.05	0.4
3. 1e constante in zuurstoffunctie	$G_{NIT}$		-1	0
. 2e constante in zuurstoffunctie	$F_{NIT}$	0.21	nd	nd
. constante in temperatuurfunctie	$a_{NIT}$	1.1	nd	nd
4. BOD-afbraaksnelheid	$C_{BO1}$		0.05	0.2
. 1e constante zuurstoffunctie	$F_{BOD}$	0.89	nd	nd
. 2e constante zuurstoffunctie	$G_{BOD}$	0.0	nd	nd
5. organisch-N-afbraaksnelheid	$RC_{BODN}$		0.02	0.1
6. denitrificatiesnelheid bodem	$RC_{DNB}$		0	0.1
. constante in de temperatuurfunctie	$a_{DNB}$	1.0	nd	nd
7. denitrificatiesnelheid water	$RC_{DNW}$		0	0.3
. kritisch zuurstofconcentratie water	$c_{roxcde}$	3.0	nd	nd
8. krommingsfactor zuurstoffunctie	$kf$		1	4.6
. constante in temperatuurfunctie	$a_{DNW}$	1.0	nd	nd

<sup>1</sup>: Actuele waarden alleen van belang voor parameters waarop niet gecalibreerd wordt.

Tabel 3.1 Gekozen ranges van bij de automatische calibratie beschouwde parameters. Zie formuleringen 2.1 t/m 2.5 en WL, 1992

Resultaten van de automatische calibratie (de beste fit en de gereduceerde parameterrange voor elke parameter) zijn gepresenteerd in Tabel 3.2 (en Bijlage A). Als we de beste fit (de laagste GOF) zoals bepaald in OPERAWES als uitgangspunt nemen valt op dat de GOF is verlaagd van 0.755 naar 0.675. Kijken we naar de concentraties van de stoffen die door de nieuwe formuleringen het meest aan verandering onderhevig zijn (zuurstof en nitraat) dan blijkt de gerealiseerde verbetering van de fit op het oog vrij gering (Figuur 5). In een latere paragraaf blijkt echter dat de beste mathematische fit niet noodzakelijkerwijs de beste representatie van de meetgegevens laat zien.

In de zomermaanden (juli, augustus en oktober) is het effect van denitrificatie in de waterkolom duidelijk zichtbaar in de nitraatconcentraties, het effect op zuurstof is gering. In de wintermaanden (met name in maart en december) is gemodelleerd zuurstof meer in overeenstemming met de metingen. Ten opzichte van OPERAWES geeft de huidige beste fit een hogere zuurstofconcentratie in het zeedeel van het estuarium hetgeen veroorzaakt wordt door een lagere afbraak van organische stof ( $RC_{BO1}$  is 0.163 tov 0.172  $d^{-1}$ ). In het bovenstroomse deel is de zuurstofconcentratie lager hetgeen veroorzaakt wordt door een effectief grotere nitrificatie: ondanks het feit dat  $RC_{NIT}$  fors kleiner geworden is (0.171 tov 0.26  $d^{-1}$ ) is door invoering van de kromming in de zuurstoffunctie voor nitrificatie het produkt van  $RC_{NIT}$  en  $g_N(O_2)$  groter geworden door de sterke kromming ( $G_{NIT} = -0.865$ , zie Figuur 1). Het gevolg van meer nitrificatie in de winter in het bovenstroomse deel is ook terug te vinden in de ietwat verhoogde concentraties van nitraat (deze fit wordt daarmee overigens niet substantieel beter).

Symbol	Best <sup>1</sup>	OPERAWES	un125	Min <sup>1</sup> nieuw	Max <sup>1</sup> nieuw	Reductie
1. $K_L$	1.074	1.068	1.0	1.035	1.128	0.768
2. $RC_{NIT}$	0.171	0.26	0.25	0.150	0.192	0.879
3. $G_{NIT}$	-0.865	0.0	0.0	-0.999	-0.524	0.525
$F_{NIT}$	0.21	0.21	0.23	nvt	nvt	nvt
4. $RC_{BOI}$	0.163	0.172	0.10	0.146	0.190	0.709
$F_{BOI}$	0.893	0.893	0.50			
5. $RC_{BODN}$	0.031	0.064	0.05	0.024	0.047	0.712
6. $RC_{DNB}$	0.055	0.07 <sup>2</sup>	0.10 <sup>2</sup>	0.040	0.075	0.647
7. $RC_{DNW}$	0.027	nvt	nvt	0.009	0.129	0.600
8. $k_f$	2.180	nvt	nvt	1.792	4.499	0.248
<sup>1</sup> : afgerond op 3 cijfers <sup>2</sup> : beste fit voor 'gelumpete' denitrificatie zoals beschreven in OPERAWES (WL, 1992)						

Tabel 3.2 Resultaten van de automatische calibratie. Zie voor verklaring symbolen Tabel 3.1

In de vergelijking van het calibratie-resultaat met Run125 (resultaat SAWES-calibratie) valt op dat de daar berekende hoge nitraatconcentraties in de zomer niet verlaagd worden door denitrificatie in de waterfase (zoals verwacht), maar vooral niet gehaald worden door een verminderde nitrificatie bij lage zuurstofconcentratie.

Vanwege de implicaties voor saneringsscenario's is een korte beschouwing over de twee systemen (*systeem 1*: relatief hoge nitrificatie bij lage zuurstofconcentratie, met significante denitrificatie in de waterfase versus *systeem 2*: verlaagde nitrificatie en onbelangrijke denitrificatie in de waterfase) op zijn plaats. In systeem 1 wordt relatief veel stikstof verwijderd door denitrificatie. Bij sanering van lozingen komt zuurstof in de waterkolom en verdwijnt denitrificatie aldaar. De verwijdering van stikstof wordt daardoor verminderd en het rendement van de sanering van lozing voor de export van N naar de Noordzee verlaagd. In systeem 2 zal de nitrificatie bij verhoogde zuurstofconcentraties na sanering toenemen; de nitraatconcentratie neemt daardoor toe, waardoor bodemdenitrificatie kan toenemen. Het rendement van de sanering voor de N-export naar de Noordzee wordt in dat geval versterkt.

De calibratie-procedure maakt met de gebruikte gegevens uit 1987 een keuze voor systeem 2. De vraag is echter of deze keuze aan de mathematische methode van autocalibratie kan worden overgelaten. Belangrijk is het om na te gaan of er voldoende onderscheidend vermogen in de meetgegevens zit om systeem 1 te logenstraffen. Een argument dat spreekt voor systeem 1 wordt genoemd in sectie 3.2.3: een significante denitrificatie in de waterkolom (al dan niet representatief voor de gemiddelde waterkolom) wordt gemeten. Een methode om na te gaan of systeem 1 een voldoende representatie kan geven van de meetgegevens is om denitrificatie in de waterkolom op te leggen en een automatische calibratie-procedure uit te voeren voor de overige parameters. Lukt het vervolgens niet om een consistente samenhang in de metingen (N, O<sub>2</sub>, pH) te vinden dan kan hiervan een oorzaak worden nagegaan; op grond van een geochemische (en niet een mathematische) beschouwing zou systeem 1 dan verworpen kunnen worden. Aan de andere kant is het denkbaar dat ondanks een mindere fit de metingen toch voldoende consistent gemodelleerd kunnen worden. In dat geval moet worden nagegaan door middel van welk onderzoek onderscheid gemaakt kan worden tussen de twee systemen.

### 3.2.2 Parametercombinaties uit de 'vase'

Bij de automatische calibratie in het OPERAWES-project is reeds gebleken dat bij verschillende combinaties van nitrificatie en (gelumpte) denitrificatie ( $RC_{DENIT}$ ) nagenoeg dezelfde concentraties worden berekend. Dit werd weergegeven door het volgende lineaire verband:

$$RC_{DENIT} = 0.038 + 0.245 * RC_{NIT}, R^2 = 0.67.$$

Ook na de in deze studie uitgevoerde automatische calibratie bestaat er nog een lineair verband tussen de bodemdenitrificatie ( $RC_{DNB}$ ) en de nitrificatie:

$$RC_{DNB} = -0.02 + 0.45 * RC_{NIT}, R^2 = 0.52.$$

Het gevolg is dat de onzekerheid in met name de denitrificatieflux in het gehele estuarium dus niet is weggenomen. De berekeningen met de uiterste waarden voor  $RC_{DNB}$  (no 23 en 44) zijn niet uitgevoerd. De variatie van  $\pm 35\%$  in OPERAWES werd namelijk veroorzaakt door een spreiding in  $RC_{DEN}$  van 0.063-0.127 m.d<sup>-1</sup>, deze spreiding is na de huidige automatische calibratie nauwelijks gereduceerd (0.040-0.074 m.d<sup>-1</sup>). De in OPERAWES beschreven 'rek' in het model is dus blijkbaar niet weggenomen door uitbreiding met de denitrificatieformulering voor de waterfase.

De spreiding in de parameters die betrekking hebben op denitrificatie in de waterkolom is ná de automatische calibratie onderzocht. Er zijn daartoe handmatig met het SAWES-instrumentarium een aantal combinaties uit de 'vase' doorgerekend (run 8, 29, 21, 20, 22 en 31, Bijlage A).

In Figuur 6 valt vooral de grote spreiding in de nitraatconcentraties in de bovenloop op (zuurstof heeft een kleinere spreiding). Ten opzichte van OPERAWES is de spreiding in nitraat opvallend groot. Om na te gaan hoe zulke verschillende fits toch dezelfde GOF opleveren zijn de twee extreme combinaties met de meetgegevens vergeleken. De extreme runs zijn die runs waarin de denitrificatie (produkt van  $RC_{DNW}$  en  $g_N(O_2)$  bij  $O_2 = 1 \text{ mg.L}^{-1}$ , zie Bijlage A) in de waterkolom het meest verschilt: berekening no. 31 kent de grootste denitrificatie ( $0.036 \text{ m.d}^{-1}$ ) terwijl berekening no. 22 de laagste denitrificatie in de waterkolom heeft ( $0.004 \text{ m.d}^{-1}$ ).

De resultaten voor zuurstof, nitraat en ammonium zijn voor een winter- en een zomersituatie gepresenteerd in Figuur 7. In de winter (linker kolom in Figuur 7) is te zien dat de ammoniumfit van de run met de grootste denitrificatie (getrokken lijn) beter is, als gevolg van een lagere nitrificatie (zie Bijlage A). Het effect van het verschil in nitrificatie is (door de relatief geringe bijdrage ervan) niet te zien in de zuurstof- en nitraatconcentraties in de winter. In de zomer wordt het verschil tussen run 22 en run 31 bepaald door denitrificatie in de waterkolom en zijn de verschillen significant (volgens ons is run 22 wezenlijk beter dan run 31). Het mathematisch criterium maakt dus geen onderscheid tussen run 22 en run 31 (voor berekening 31 compenseert de 'betere' fit van ammonium in de winter dus blijkbaar de mindere fit van nitraat in de zomer). Het gevolg van het gebruik van een mathematisch criterium dient derhalve nauwkeurig in de gaten te worden gehouden: in het onderhavige geval kan bijvoorbeeld besloten worden niet op de meetgegevens van ammonium te calibreren. Ook kan overwogen worden om de oorzaak van de grote afwijking tussen model en ammonium-metingen te onderzoeken (door bijvoorbeeld te kijken naar de invloed van de lozingen).

Een kanttekening over de aan het begin van deze paragraaf beschreven relatie tussen nitrificatie en bodemdenitrificatie is dat hij inherent is aan de keuze om mede op ammonium te calibreren. De fit van de ammoniumconcentratie is niet wezenlijk verbeterd, maar bepaalt wel de GOF. Zonder deze kanttekening is het uitvoeren van statistische analyse op de parametercombinaties uit de 'vase' niet zinvol.

### 3.2.3 Balansen

De twee berekeningen uit de 'vase' met de grootste en kleinste denitrificatie zijn qua nitraatbalans van het hele estuarium in Tabel 3.3 vergeleken met de tot nu toe beschikbare 'beste fits' (twee automatische en een handmatige).

identificatie	Bodem Denit	Water Denit	Som Denit	Nitrificatie	Uitstr (N-tot)	Denit
Run 125	-16,5	0,0	-16,5	44,2	54,6	24%
OPERAWES	-22,0	0,0	-22,0	45,6	49,3	32%
Beste fit (29)	-12,1	-1,1	-13,2	36,8	57,6	19%
Hoogste denit (31)	-12,0	-2,1	-14,1	37,8	56,7	21%
Laagste denit (22)	-12,5	-0,5	-13,0	36,0	58,0	19%
Processen in $\text{kT N.j}^{-1}$						

Tabel 3.3 Totale denitrificatie (waterkolom en bodem) en nitrificatie in het Schelde-estuarium

Het meest opvallende aan Tabel 3.3 is de significant lagere totale denitrificatie in het estuarium ten opzichte van Run125 en de beste fit uit OPERAWES. De lagere denitrificatie wordt veroorzaakt door een lagere nitrificatie in het gehele estuarium. De lagere nitrificatie is het gevolg van de kromming die in de zuurstofformulering voor nitrificatie is opgenomen. Daardoor is het nitrificatie proces (volgens de lagere GOF) beter beschreven (zie ook 3.2.1). De verschillen in denitrificatie- en nitrificatiefluxen worden gecompenseerd door de uitstroming van stikstof naar de Noordzee. De beschrijving van het systeem volgens de autocalibratie komt overeen met systeem 2 (zie paragraaf 3.2.1).

De lagere bodemdenitrificatie komt beter overeen met wat berekend is uit toepassing van een diagenetisch model en directe metingen in modelsegment 12 (Boderie et al., 1993). Als de waarde voor dit segment geëxtrapoleerd wordt naar het gehele estuarium, bedraagt de bodemdenitrificatieflux  $-13.9 \text{ kTN.j}^{-1}$ .

Vergelijking van de berekende denitrificatieflux in de waterkolom met veldmetingen is lastiger. Zonder literatuuronderzoek is ons slechts één waarde bekend:  $0.01 \text{ kg N.m}^{-3}.\text{j}^{-1}$  (Billen, 1978<sup>B</sup>). In combinatie met het volume van de modelsegmenten waar denitrificatie in de waterkolom plaatsvindt (1 t/m 4 à 5) levert dit een denitrificatieflux van 1.5 à 2.2 kT  $\text{N.j}^{-1}$  op. Omdat het hier gaat om een relatief oude meting en er weinig bekend is over de omstandigheden waaronder ze bepaald werd en de representativiteit voor de gehele waterkolom, is voorzichtigheid geboden.

## 4 Conclusies en aanbevelingen

De ingebouwde formulering voor denitrificatie in de waterkolom voldoet aan verwachtingen. Het modelgedrag is gevoelig voor de geïmplementeerde formulering.

De uitgevoerde autocalibratie geeft het inzicht dat hierbij niet de optimale werkwijze is gevolgd. De grote spreiding van de berekende nitraatconcentraties ná autocalibratie wordt veroorzaakt door de grote bijdrage van de matige fit van de ammoniumconcentraties aan de discrepantie tussen model en meetgegevens.

Op theoretische gronden zijn twee systemen te onderscheiden die een gewenste verlaging van de nitraatconcentratie in de bovenloop kunnen verklaren: *systeem 1* met relatief hoge nitrificatie bij lage zuurstofconcentratie, en met significante denitrificatie in de waterfase versus *systeem 2* met verlaagde nitrificatie en onbelangrijke denitrificatie in de waterfase. Volgens het gehanteerde mathematische criterium in de autocalibratie krijgt systeem 2 de voorkeur. Gezien de knelpunten in dit criterium/ onze twijfel bij dit criterium en aanwijzingen van het belang van denitrificatie in de waterkolom, is het belangrijk om te pogen systeem 1 nader op zijn merites te beoordelen. Temeer omdat de verschillen tussen de twee systemen belangrijk zijn daar ze van invloed zijn op het rendement van sanering van lozingen. Dit rendement is van invloed op de export van stikstof naar de Noordzee. Billen (1985; Billen et al., 1990) maakt een duidelijke keuze voor systeem 1.

### Aanbevelingen voor volgend onderzoek zijn:

1. Een methode om na te gaan of systeem 1 een voldoende representatie kan geven van de meetgegevens is om denitrificatie in de waterkolom op te leggen en een automatische calibratie-procedure uit te voeren voor de overige parameters. Lukt het vervolgens niet om een consistente samenhang in de metingen (N, O<sub>2</sub>, pH) te vinden dan kan hiervan een oorzaak worden nagegaan; op grond van een geochemische (en niet een mathematische) beschouwing zou systeem 1 dan verworpen kunnen worden. Aan de andere kant is het denkbaar dat ondanks een mindere fit de metingen toch voldoende consistent gemodelleerd kunnen worden. In dat geval moet worden nagegaan door middel van welk onderzoek onderscheid gemaakt kan worden tussen de twee systemen. Een opzet voor aard, locatie en tijdstip van veldonderzoek kan op dat moment gemaakt worden.

De implicaties van de systeembeschrijving voor de gevolgen van lozingssanering moeten worden vastgesteld. Deze activiteit kan onderdeel uitmaken van de analyse van de geldigheid van de twee genoemde systemen. Een vergelijking met de (model-)opvattingen van Billen (Billen et al., 1990) zou buitengewoon interessant zijn, met name vanwege het belang van communicatie binnen het bilaterale landen-overleg.



2. De invloed van de matige fit van ammonium op de GOF is bepalend voor de resultaten van de autocalibratie. Het is te overwegen om autocalibratie toe te passen op een meetset zonder ammonium, of met een sterk gereduceerde set ammonium-metgegevens; alleen de metingen op de belangrijkste gradiënten zouden dan worden meegenomen. Het is ook sterk aan te bevelen om te onderzoeken hoe de fit van de ammoniummetingen wezenlijk verbeterd kan worden. We denken hierbij bijvoorbeeld aan de grootte en de positie van de lozingen. Bij deze calibratie dient dan het effect van temperatuurfuncties ( $a_{\text{NIT}}$ ,  $a_{\text{DNB}}$  en  $a_{\text{DNW}}$ ) bekeken te worden.

Een waardevolle uitbreiding van SENECA zou zijn het geven van informatie over de opbouw van de GOF. Per gecalibreerde stof zou per meting (tijdstip en locatie) de bijdrage zichtbaar gemaakt moeten worden. Deze gegevens geven inzicht in het functioneren van het mathematisch criterium.

3. Bij een bevredigende systeembeschrijving voor het calibratiejaar 1987 verdient het aanbeveling om een validatie uit te voeren met meerjarige meetgegevens (WORSRO-bestand).

## 5 Literatuur

- Billen, G. (1978A).  
A budget of nitrogen recycling in North Sea sediments off the Belgian coast. *Est. Coast. Shelf Sci.* 7: 127
- Billen, G. (1978B).  
Biogeochemistry of estuarine sediments. Proceedings of the UNESCO/SCOR workshop. Melreux, 1976.
- Billen, G., Servais, P., Lancelot, C., Rousseau, V., Anzil, A. and Dandois, J.-M. (1990).  
Modele mathématique de l'estuaire de l'escaut (MODESTY). Ministère de la Santé et de l'Environnement. Réf BH/88/26.
- Boderie, P. M. A., J. J. G. Zwolsman, G. T. M. van Eck and C. H. van der Weijden, (1993).  
Nutrient biogeochemistry in the water column (N, P, Si) and pore-water (N) of sandy sediment of the Scheldt Estuary (SW-Netherlands). *ECSA 21 Proceedings*.
- Jorgensen, K. S., Jensen, H. B. and Revsbech, N. P. (1984).  
Nitrous oxide production from nitrification and denitrification in marine sediment at low oxygen concentrations. *Can. J. Microbiol.* 30: 1073-1078.
- Lloyd, D., Boddy, L., and Davies, J. P. (1987).  
Persistence of bacterial denitrification capacity under aerobic conditions: the rule rather than the exception. *Microbiology Ecology* 45: 185-190.
- Payne, W. J. (1973).  
Reduction on nitrogenous oxides by microorganisms. *Bacterial. Rev.* 37: 409-452.
- Seitzinger, S. P. (1988).  
Denitrification in freshwater and coastal marine ecosystems: Ecological and geochemical significance. *Limnol. Oceanogr.* 33: 702-724.
- WL, (1991).  
Waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, SAWES-nota 91.01, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T257 (concept).
- WL, (1992)  
Operationalisering van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, OPERAWES-nota 1a, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T941.

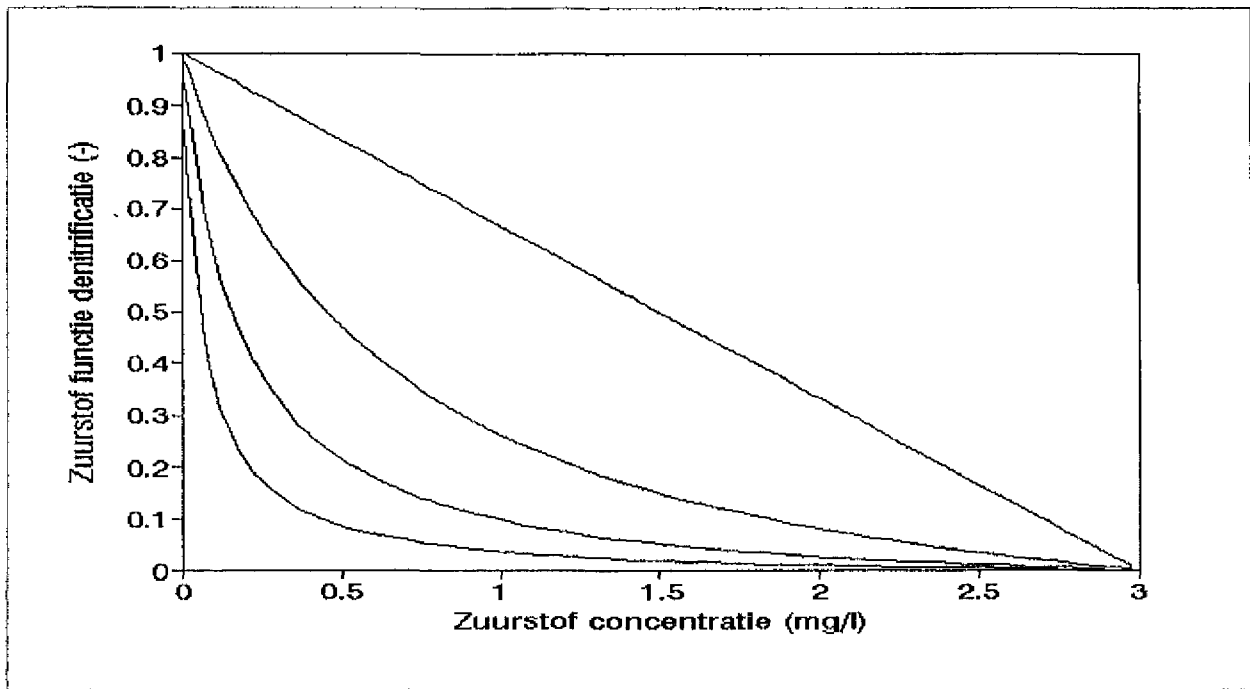
## Bijlage A Parametercombinaties voor 50 berekeningen in de 'vase' met de daaruit berekende nitrificatie- en denitrificatiesnelheid bij een zuurstofconcentratie van 1 mg/l

Model : SAWES Version: 1.0  
 File : SAWES.RSC Last update: 1992/11/22 15:39:08  
 Contains : 8 random parameters  
 Simulation period  
 Start : 1987/ 1/ 1  
 Stop : 1987/12/27

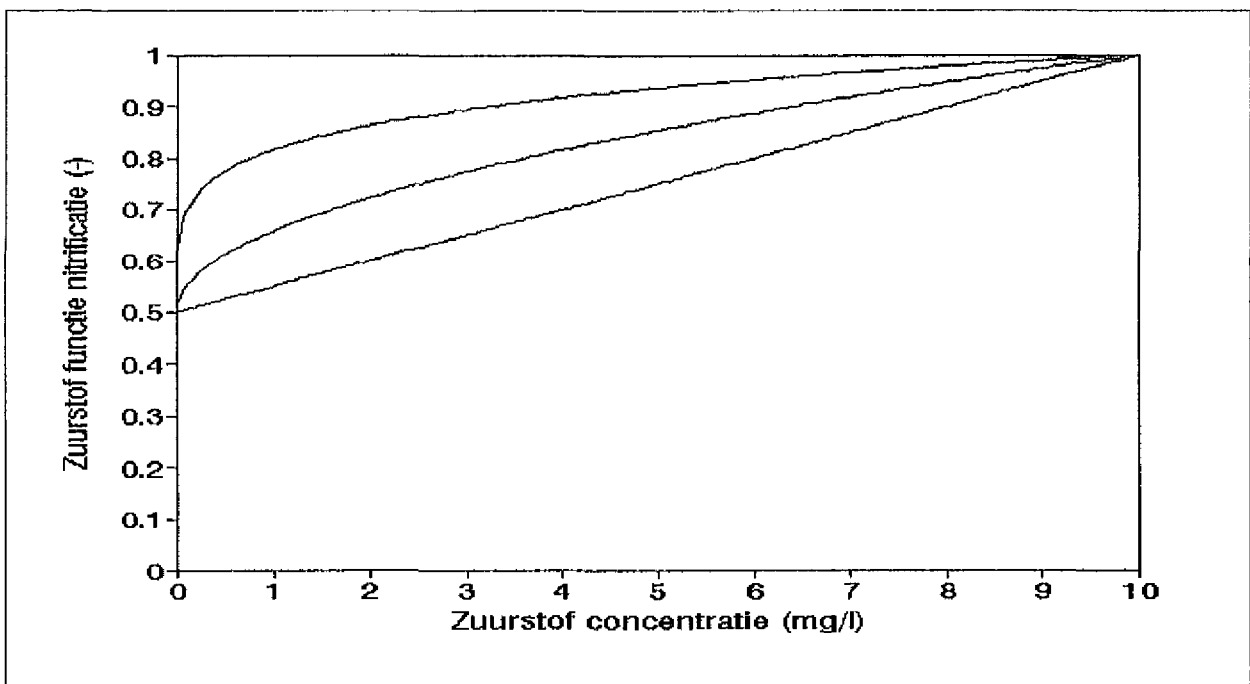
	RO2	RCBO1	RCBON	RCNIT	RCDNB	GNIT	RCDNW	KFDNW	GOF	Nit:	Den:
29	1.0739	0.1630	0.0310	0.1712	0.0545	-0.8651	0.0269	2.1804	0.6746	0.15	0.010
45	1.0452	0.1539	0.0299	0.1529	0.0418	-0.9991	0.1016	3.7806	0.6749	0.14	0.030
17	1.1008	0.1896	0.0424	0.1754	0.0582	-0.6237	0.0628	3.7093	0.6753	0.14	0.019
22	1.0806	0.1612	0.0239	0.1797	0.0564	-0.7319	0.0116	1.9592	0.6754	0.15	0.005
40	1.0659	0.1591	0.0289	0.1670	0.0556	-0.7820	0.0222	1.7917	0.6755	0.14	0.009
6	1.0606	0.1545	0.0251	0.1732	0.0516	-0.7568	0.0117	1.8280	0.6757	0.14	0.005
50	1.0913	0.1750	0.0411	0.1765	0.0561	-0.6992	0.0685	4.1632	0.6758	0.14	0.019
34	1.0700	0.1716	0.0339	0.1671	0.0537	-0.8340	0.0701	3.2353	0.6761	0.14	0.022
47	1.0728	0.1652	0.0297	0.1803	0.0617	-0.7812	0.0288	2.3445	0.6764	0.15	0.011
41	1.0808	0.1639	0.0278	0.1797	0.0604	-0.6835	0.0115	2.1952	0.6766	0.15	0.004
19	1.0881	0.1536	0.0269	0.1697	0.0575	-0.8071	0.0089	1.8588	0.6767	0.14	0.004
44	1.0349	0.1460	0.0289	0.1498	0.0396	-0.8374	0.0559	3.9430	0.6768	0.13	0.016
4	1.0718	0.1597	0.0319	0.1664	0.0579	-0.8724	0.0544	2.7156	0.6771	0.14	0.019
10	1.0728	0.1466	0.0246	0.1714	0.0575	-0.8879	0.0350	1.9798	0.6773	0.15	0.014
7	1.0920	0.1771	0.0434	0.1705	0.0575	-0.7925	0.0758	4.1066	0.6773	0.14	0.021
5	1.0515	0.1624	0.0400	0.1685	0.0517	-0.9310	0.1114	3.9446	0.6773	0.15	0.032
18	1.0863	0.1598	0.0379	0.1620	0.0514	-0.8357	0.0879	3.9525	0.6775	0.14	0.025
36	1.0757	0.1551	0.0296	0.1649	0.0523	-0.7898	0.0800	3.1100	0.6776	0.14	0.026
33	1.0862	0.1746	0.0463	0.1730	0.0574	-0.8247	0.0692	3.6941	0.6777	0.15	0.021
15	1.0538	0.1488	0.0264	0.1594	0.0501	-0.9089	0.0430	2.4539	0.6777	0.14	0.016
16	1.1065	0.1643	0.0342	0.1738	0.0556	-0.7667	0.0424	3.6868	0.6778	0.15	0.013
14	1.0749	0.1557	0.0238	0.1753	0.0487	-0.8420	0.0338	2.4083	0.6778	0.15	0.013
32	1.0730	0.1628	0.0394	0.1647	0.0515	-0.8638	0.1289	4.4988	0.6779	0.14	0.034
1	1.1121	0.1722	0.0432	0.1798	0.0602	-0.6613	0.0635	4.0053	0.6779	0.14	0.018
13	1.0963	0.1735	0.0389	0.1666	0.0513	-0.8885	0.0964	4.0701	0.6781	0.15	0.027
25	1.0544	0.1460	0.0250	0.1675	0.0519	-0.7651	0.0320	2.3536	0.6781	0.14	0.012
2	1.0542	0.1484	0.0269	0.1799	0.0506	-0.8677	0.0230	2.3126	0.6782	0.16	0.009
21	1.0692	0.1527	0.0280	0.1544	0.0503	-0.7974	0.0449	3.0235	0.6782	0.13	0.015
35	1.1140	0.1813	0.0345	0.1624	0.0517	-0.8512	0.0411	3.4468	0.6783	0.14	0.013
43	1.1201	0.1819	0.0428	0.1747	0.0618	-0.8237	0.0969	4.0172	0.6783	0.15	0.028
38	1.0858	0.1478	0.0238	0.1796	0.0551	-0.7928	0.0313	1.9609	0.6783	0.15	0.013
48	1.0921	0.1610	0.0290	0.1601	0.0578	-0.6779	0.0186	2.7618	0.6783	0.13	0.006
27	1.0828	0.1619	0.0254	0.1711	0.0560	-0.6986	0.0112	2.1259	0.6783	0.14	0.004
24	1.1097	0.1749	0.0403	0.1747	0.0583	-0.7349	0.0892	4.4887	0.6785	0.14	0.024
37	1.0517	0.1588	0.0314	0.1788	0.0577	-0.6455	0.0467	3.0136	0.6785	0.14	0.016
31	1.0920	0.1769	0.0385	0.1683	0.0543	-0.6592	0.1216	3.7304	0.6789	0.13	0.036

26	1.1146	0.1814	0.0311	0.1550	0.0418	-0.9918	0.0632	3.6337	0.6789	0.14	0.019
3	1.1050	0.1631	0.0370	0.1650	0.0535	-0.8115	0.0648	3.2801	0.6791	0.14	0.021
23	1.1198	0.1781	0.0389	0.1899	0.0748	-0.6792	0.0261	2.4374	0.6792	0.15	0.010
30	1.1279	0.1827	0.0368	0.1923	0.0627	-0.6608	0.0450	3.1253	0.6794	0.15	0.015
42	1.0640	0.1482	0.0253	0.1746	0.0504	-0.8880	0.0203	2.4269	0.6794	0.15	0.007
12	1.1226	0.1672	0.0316	0.1686	0.0555	-0.6831	0.0189	3.0295	0.6794	0.14	0.006
28	1.0755	0.1578	0.0267	0.1572	0.0569	-0.8318	0.0130	1.8157	0.6795	0.13	0.005
46	1.0664	0.1591	0.0376	0.1698	0.0500	-0.8023	0.0804	4.2682	0.6795	0.14	0.022
49	1.0720	0.1662	0.0299	0.1913	0.0603	-0.5237	0.0537	2.5373	0.6795	0.14	0.019
39	1.0935	0.1740	0.0468	0.1727	0.0633	-0.8004	0.0888	4.2800	0.6796	0.15	0.024
20	1.1156	0.1858	0.0413	0.1749	0.0579	-0.6279	0.1249	4.3745	0.6796	0.14	0.034
9	1.0902	0.1734	0.0414	0.1744	0.0525	-0.8551	0.1106	4.1645	0.6796	0.15	0.031
8	1.1106	0.1606	0.0318	0.1865	0.0591	-0.9526	0.0387	2.3022	0.6798	0.17	0.015
11	1.1054	0.1669	0.0307	0.1837	0.0650	-0.7328	0.0156	1.9879	0.6798	0.15	0.006
	RO2	RCBO1	RCBON	RCNIT	RCDNB	GNIT	RCDNW	KFDNW	GOF		
max											
	1.1279	0.1896	0.0468	0.1923	0.0748	-0.5237	0.1289	4.4988	0.6798	0.17	0.036
min											
	1.0349	0.1460	0.0238	0.1498	0.0396	-0.9991	0.0089	1.7917	0.6746	0.13	0.004
avg											
	1.0845	0.1645	0.0332	0.1713	0.0552	-0.7884	0.0545	3.0903	0.6779	0.14	0.017
std											
	0.0223	0.0113	0.0066	0.0094	0.0059	0.0992	0.0337	0.8680	0.0014	0.01	0.009

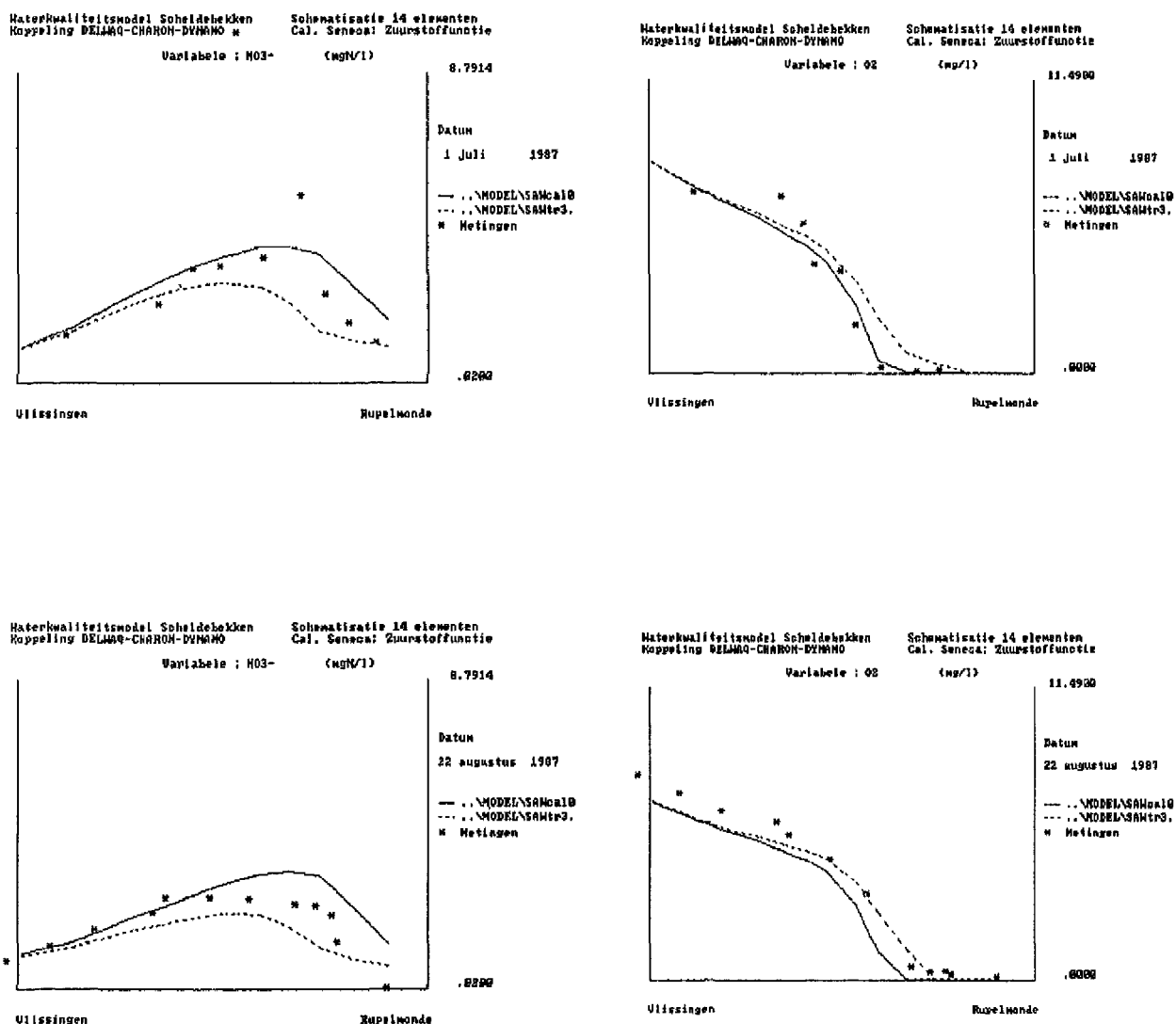
# Figuren



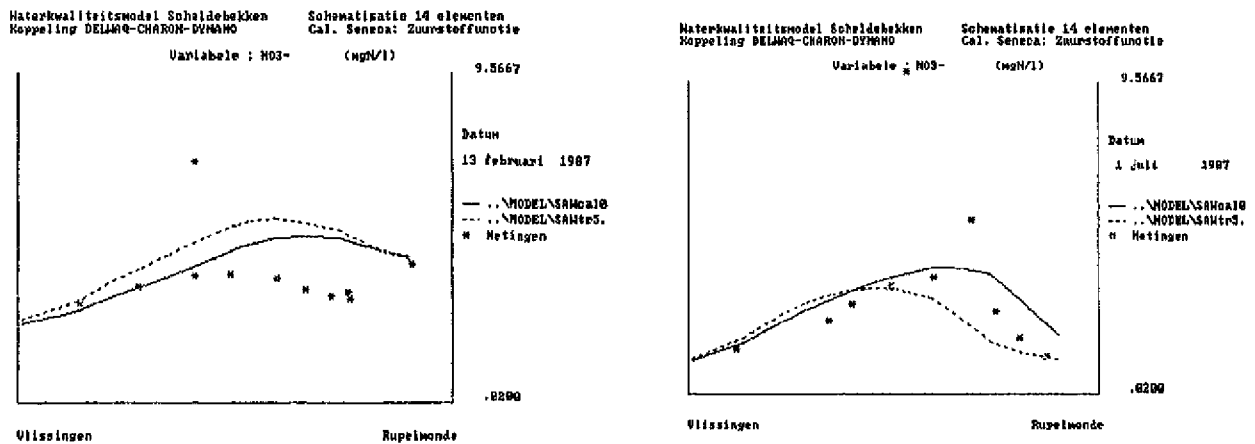
Figuur 1 Zuurstoffunctie voor denitrificatie. De rechte lijn is het resultaat voor  $k_f=1$ , kromming neemt toe met toenemende  $k_f$  (2, 3 en 4). De waarde van Croxde bedraagt  $3 \text{ mgO}_2 \cdot \text{L}^{-1}$ .



Figuur 2 Zuurstoffunctie voor nitrificatie, BOD-afbraak en BODN-afbraak. Rechte lijn ( $G_{\text{NIT}}=0$ ) is identiek aan de functie gebruikt in SAWES (WL, 1989). Overige lijnen voor  $G_{\text{NIT}}=0.3$  en  $G_{\text{NIT}}=0.7$ .

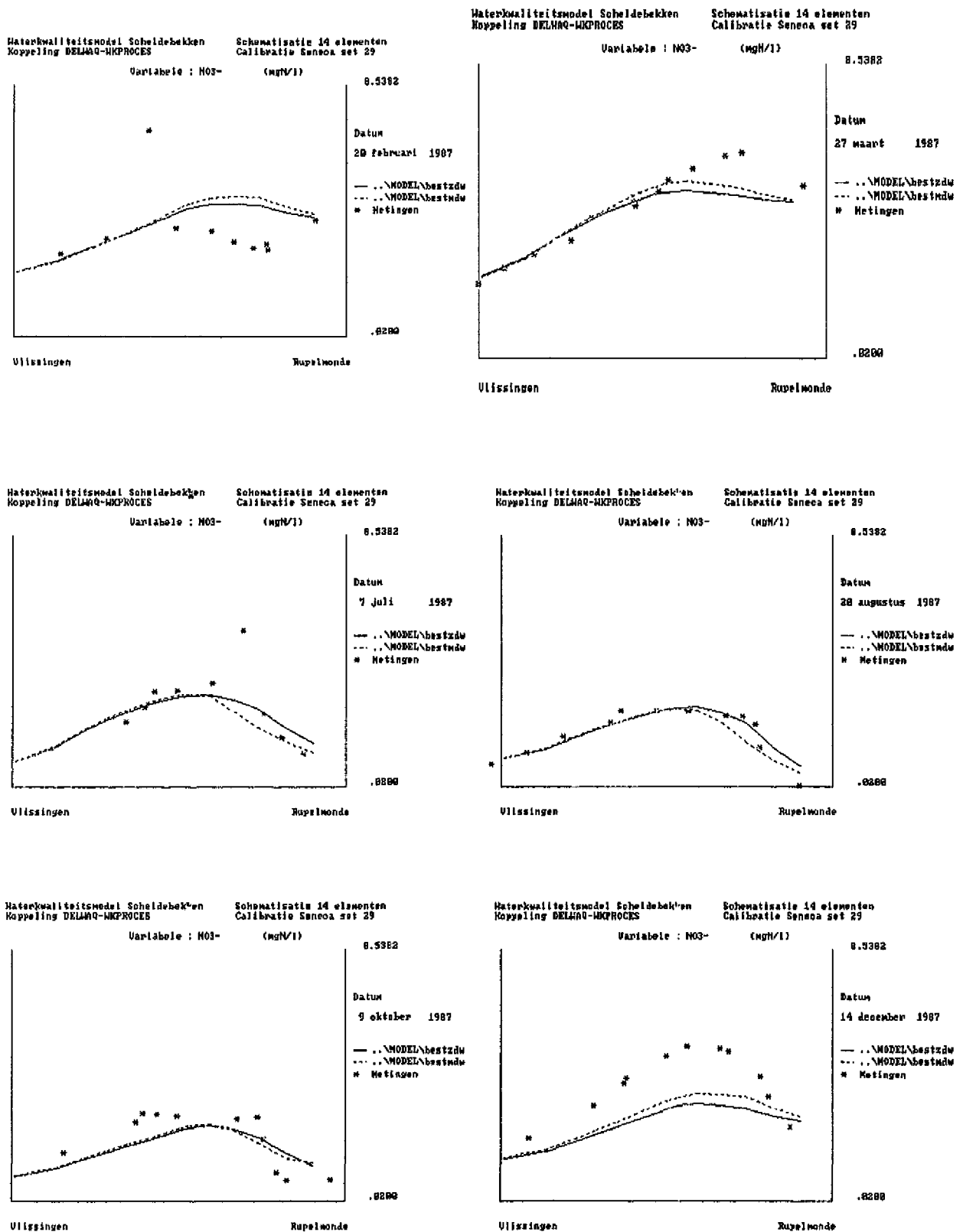


Figuur 3 Resultaat gevoeligheidsanalyse. Berekening zoals beschreven in 3.1: Run125 met extra denitrificatie in de waterfase ( $RC_{\text{DNB}} = 0.07 \text{ d}^{-1}$ ,  $RC_{\text{DNW}} = 0.3 \text{ d}^{-1}$ ,  $C_{\text{oxde}} = 2 \text{ mg.l}^{-1}$  en  $k_f = 3$ ).

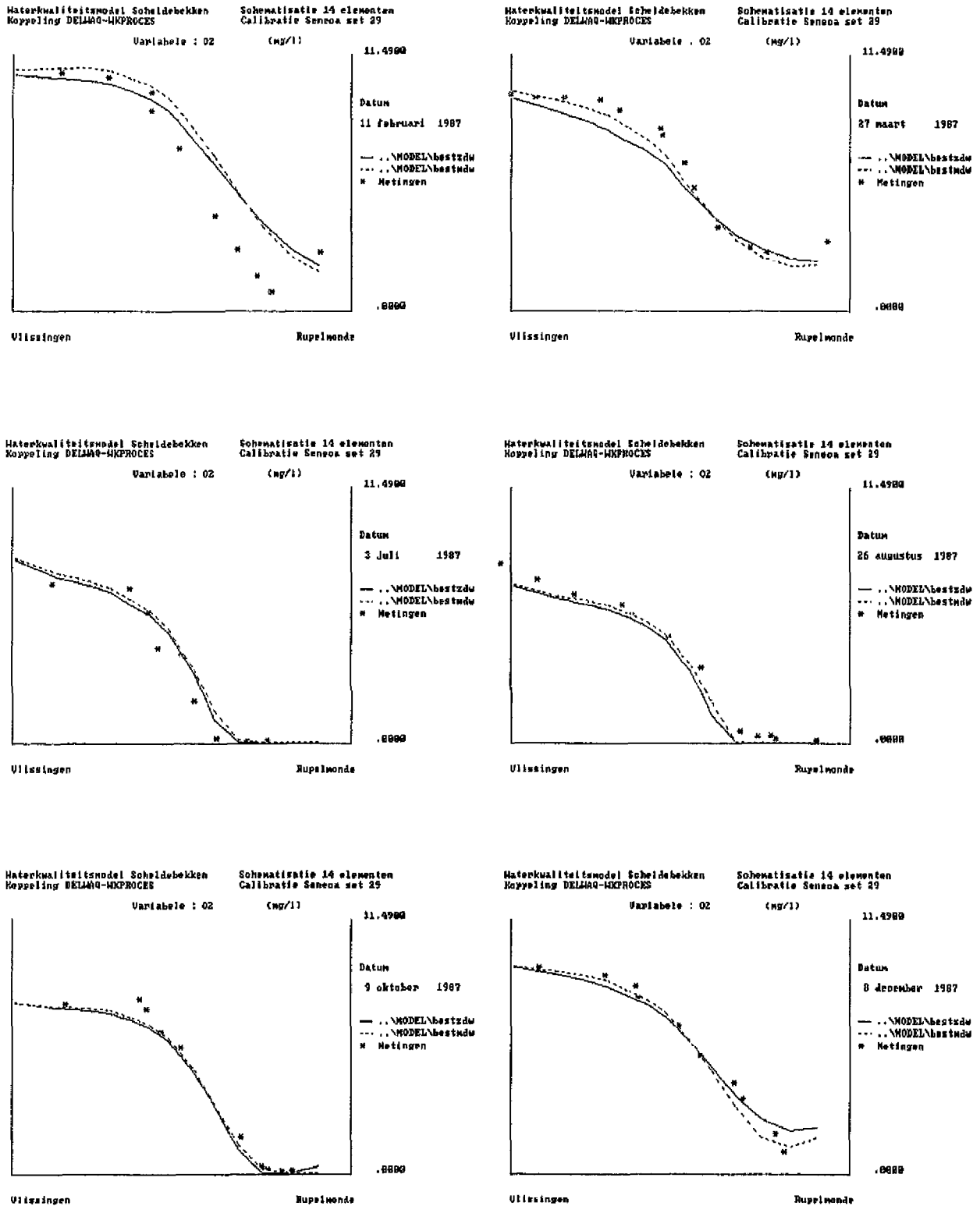


Figuur 4 Resultaat gevoeligheidsanalyse. Berekening zoals beschreven in 3.1: Run 125 zonder bodemdenitrificatie en met denitrificatie in de waterkolom ( $RC_{DNE} = 0.0 \text{ d}^{-1}$ ,  $RC_{DNW} = 0.3 \text{ d}^{-1}$ ,  $crox_{de} = 2 \text{ mg.l}^{-1}$  en  $k_f = 3$ ).





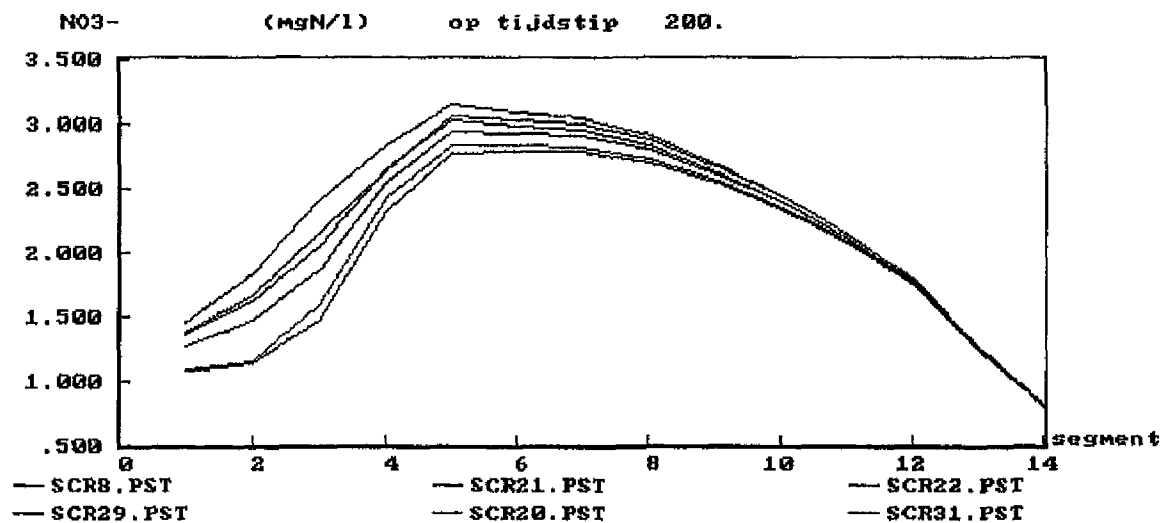
Figuur 5 Beste fit OPERAWES (WL, 1992) (bestzdw, getrokken lijn) en huidige 'beste' fit (bestmdw, stippellijn).



Figuur 5 Vervolg. Beste fit OPERAWES (WL, 1992) (bestzdw, getrokken lijn) en huidige 'beste' fit (bestmdw, stippellijn).

Waterkwaliteitsmodel Scheldebekken  
Koppeling DELWAQ-CHARON-DYNAMO

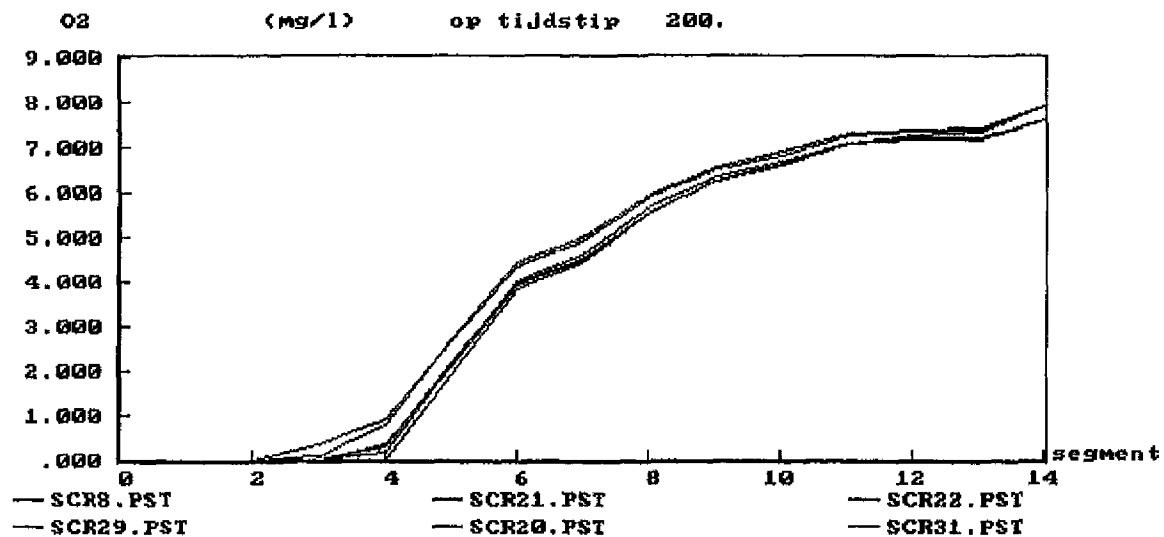
Schematisatie 14 elementen  
Cal. Seneca: Zuurstoffunctie



P=print

Waterkwaliteitsmodel Scheldebekken  
Koppeling DELWAQ-CHARON-DYNAMO

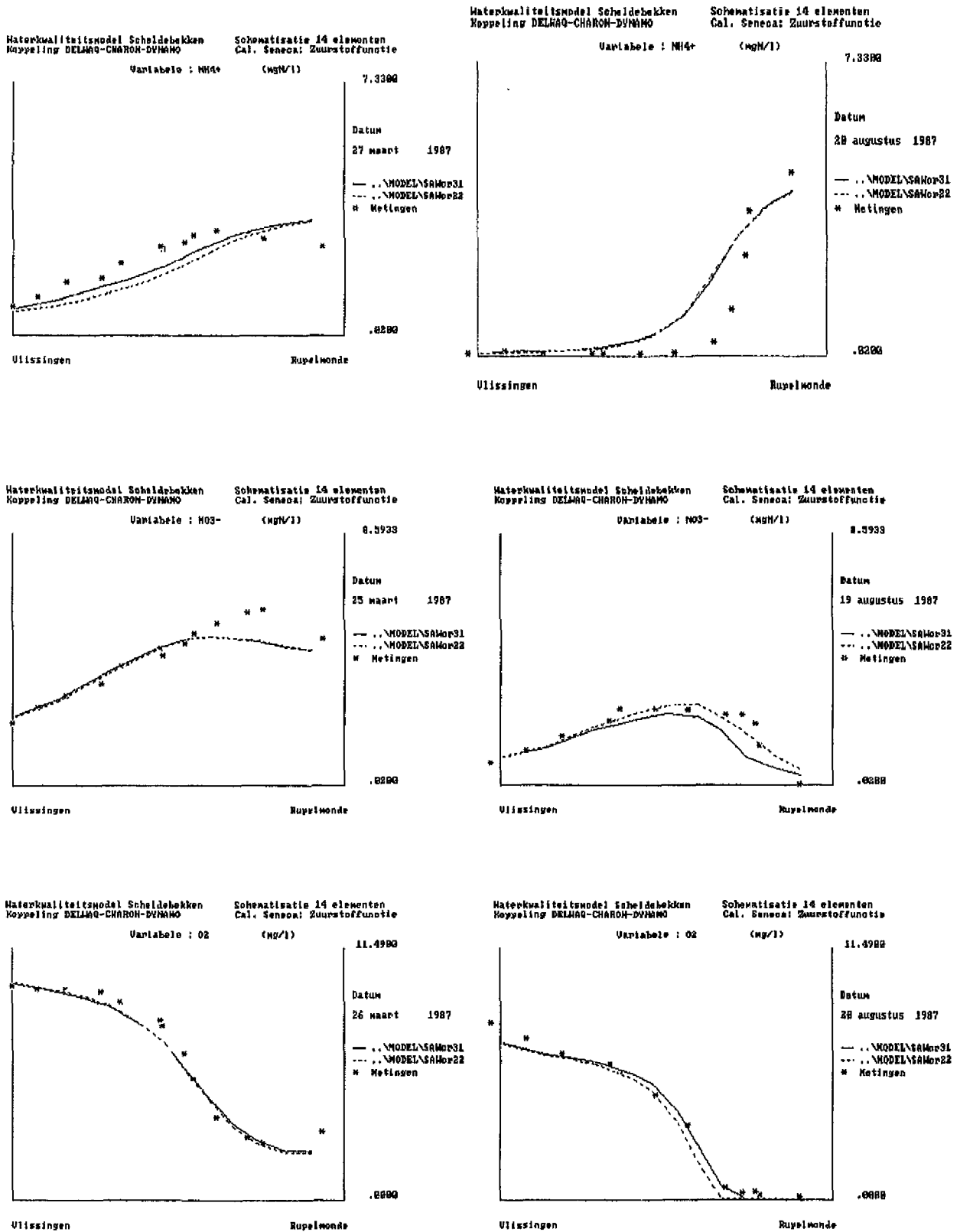
Schematisatie 14 elementen  
Cal. Seneca: Zuurstoffunctie



P=print

Figuur 6

Resultaat van automatische calibratie voor nitraat en zuurstof met parameterranges uit Tabel 3.2. Nummers verwijzen naar nummer uit de 'vase' (Bijlage 1), beste fit = berekening 29.



Figuur 7 Resultaat van automatische calibratie voor ammonium, nitraat en zuurstof. Twee extreme combinaties uit de 'vase': Hoogste denitrificatie (run 31, getrokken lijn) en de laagste denitrificatie (berekening 22, stip-pel lijn).