

# Parameteranalyse-module ten behoeve van het LIFE-instrumentarium Schelde-estuarium

Testrapport

M.R.L. Ouboter en P.G.J. ten Brummelhuis



**waterloopkundig laboratorium | WL**

# Inhoud

|          |   |       |
|----------|---|-------|
|          | <b>Samenvatting</b> .....   | ii    |
| <b>1</b> | <b>Inleiding</b> .....  | 1 – 1 |
| <b>2</b> | <b>Korte beschrijving van de methodiek</b> .....                          | 2 – 1 |
| <b>3</b> | <b>Testopzet</b> .....  | 3 – 1 |
|          | 3.1 Doel van de test .....  | 3 – 1 |
|          | 3.2 Beschrijving testcase .....   | 3 – 1 |
|          | 3.3 Verschillen tussen SENECA en de ontwikkelde module .....              | 3 – 2 |
| <b>4</b> | <b>Resultaten test</b> .....  | 4 – 1 |
| <b>5</b> | <b>Conclusies</b> .....   | 5 – 1 |
| <b>6</b> | <b>Literatuur</b> .....   | 6 – 1 |
|          | <b>Bijlagen:</b>  |       |
|          | Bijlage A      Procesformuleringen naar Boderie en Ouboter (1993) . . .   | A – 1 |
|          | Bijlage B      Instellingen parameteranalysemodule gebruikt bij de test . | B – 1 |
|          | <b>Figuren</b>  |       |

## Samenvatting

Op grond van de positieve ervaringen met parameteranalysemethoden, toegepast op het waterkwaliteitsinstrumentarium Westerschelde met behulp van de koppeling tussen SENECA en DELWAQ3, is gezocht naar mogelijkheden om dergelijke technieken toe te kunnen passen voor het LIFE-instrumentarium Westerschelde dat momenteel in ontwikkeling is. Het waterkwaliteitsmodel dat in het LIFE-instrumentarium wordt gebruikt, is DELWAQ4. Gezien de specifieke uitbreidingen in DELWAQ4, met name de voorziening van een uitgebreide bibliotheek van procesformuleringen, zou het bewerkstelligen van een koppeling tussen SENECA en DELWAQ4 een aanzienlijke inspanning in de SENECA-source betekenen. Er is daarom gekozen voor het ontwerp en de implementatie van een module waarmee het mogelijk is een te definiëren parameterruimte te analyseren binnen een toepassing van DELWAQ4.

De module is, evenals het pakket SENECA gebaseerd op de methode van Price. Op grond van de definitie van een kostenfunctie wordt een deelruimte binnen een a priori gedefinieerde parameterruimte gegenereerd, zodat de modeluitkomsten de veldmetingen adequaat beschrijven. Naast een tabel met parametercombinaties binnen de deelruimte, levert de methode een grafische weergave van de spreiding in berekende concentraties (per definitie klein) en (veel belangrijker) fluxen. De variatie in de fluxen is met name van belang voor het begrip van het functioneren van het waterkwaliteitssysteem op basis van beschikbare kennis en informatie over belastingen, waterbeweging, processen en veldmetingen. Bovendien is de onzekerheid in de fluxen in een actuele situatie een basis voor het vaststellen van een onzekerheid in concentraties die worden voorspeld bij het doorrekenen van maatregelen en scenario's.

De module is getest door toepassing op dezelfde case als waarvoor SENECA-DELWAQ3 is getest: het SAWES-waterkwaliteitsmodel voorzien van in het kader van SAWES verzamelde veldgegevens van 1987. Uit de test blijkt dat met behulp van de vervaardigde module gelijksoortige informatie over de relatie tussen het model en de geobserveerde waterkwaliteit gevonden wordt als bij de toepassing van SENECA indertijd. Belangwekkend is dat bij een definitie van de kostenfunctie (die een uitdrukking is van de afwijking tussen modelresultaat en veldwaarnemingen) die in geringe mate afwijkt van de definitie in de SENECA-toepassing, een andere zone van de parameterruimte wordt gevonden, die echter ook goede resultaten geeft. In deze zone worden andere afhankelijkheden tussen de verschillende parameters gevonden dan destijds in de resultaten van SENECA. Interpretatie van de resultaten van deze test leert dat de vervaardigde module geschikt is voor het analyseren van modelparameters. Zij geeft echter ook aan dat specifieke kennis van zaken over de modelformuleringen en de veldwaarnemingen vereist is voor de goede keuze van de parameters die de kostenfunctie bepalen. De gebruiker moet zich realiseren dat de keuzes ten aanzien van de definitie van de kostenfunctie in samenhang met de eigenschappen van de meetseries consequenties hebben voor de resultaten van de analyse.

# 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 (Boderie en Ouboter, 1992), dat ontwikkeld is door het toenmalige DIHO (nu NIOO-CEMO) 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.

In 1993 is een ontwikkeling begonnen waarbij in het kader van LIFE de waterkwaliteitsmodellering in SAWES wordt uitgebreid (meer stoffen, uitbreiding naar de kustzone), waarvoor gebruik wordt gemaakt van DELWAQ4. Daarmee ontstaat de behoefte aan de beschikking over de methode van Price (1976) in DELWAQ4. Het kenmerkende verschil tussen het onder SENECA draaiende DELWAQ3.05 en het huidige DELWAQ4 is dat laatstgenoemde versie is voorzien van een zogenaamde processen-bibliotheek. De gebruiker van DELWAQ4 kan op flexibele manier een model opzetten gebruik makend van in de bibliotheek opgenomen procesformuleringen. Dit gegeven is er de oorzaak van dat het koppelen van DELWAQ4 aan SENECA (2.0) een aanzienlijke aanpassing in de SENECA-omgeving tot gevolg zou hebben.

Omdat de methode van Price waardevol is gebleken (Boderie en Ouboter, 1992), is het belangrijk om binnen het LIFE-project toch te kunnen beschikken over een parameteranalyse-module gebaseerd op deze methode. Daarom is een samenwerking tussen RIKZ en WL opgezet, die geresulteerd heeft in een functioneel ontwerp (aandeel van RIKZ vastgelegd in opdrachtbon 42943099), een technisch ontwerp (opdrachtbon 42943398), een testmodel onder DELWAQ4 en een prototype van een parameteranalysemodule voorzien van een gebruikershandleiding en het voorliggende testrapport (alle volgens opdrachtbon 42950353). In dit rapport wordt eerst een korte beschrijving gegeven van de methode van Price (hoofdstuk 2). Vervolgens wordt de testopzet beschreven (hoofdstuk 3). Hoofdstuk 4 beschrijft de resultaten van de test. In hoofdstuk 5 worden conclusies getrokken.

Aan het samenwerkingsverband tussen RIKZ en WL hebben de volgende personen bijgedragen: drs. B.J. Kater (projectleider namens RIKZ), dr. G.T.M. van Eck, drs. M.W.M. van der Tol (allen RIKZ), dr. ir. P.G.J. ten Brummelhuis, J.K.L. van Beek, J. Ansink, drs. M. Hogeweg en drs. M.R.L. Ouboter (allen WL en laatstgenoemde projectleider namens WL).

## 2 Korte beschrijving van de methodiek

De methode van Price richt zich op het selecteren van een verzameling parameterinstellingen waarmee de veldwaarnemingen volgens een, als kostenfunctie te definiëren criterium gereproduceerd kunnen worden. Op basis van de, in termen van de waarde van de kostenfunctie (Goodness of fit of GoF-waarde), meest succesvolle runs bepaalt de methode een nieuw te evalueren parameterinstelling. De mate van succes van deze parameterinstelling in het reproduceren van de metingen, oftewel de GoF-waarde, wordt gekwantificeerd. Bij voldoende succes vervangt de modelrun de minst succesvolle run uit de geselecteerde verzameling. Gaandeweg de procedure verbetert hierdoor de kwaliteit van de geselecteerde verzameling parameter-instellingen, gegeven een gekozen definitie van de kostenfunctie.

De gebruiker van de module definieert:

- de parameters die gevarieerd worden en de grenzen waarbinnen ze gevarieerd worden,
- de uitvoer-variabelen waarvoor meetgegevens beschikbaar zijn, die gereproduceerd moeten worden, en die dus worden opgenomen in de kostenfunctie,
- eventuele weegfactoren met behulp waarvan verschillende uitvoervariabelen in verschillende mate worden meegewogen, en
- het aantal berekeningen dat moet worden uitgevoerd om een eveneens door te gebruiker te bepalen aantal geselecteerde combinaties van parameterinstellingen te vinden.

Als resultaat krijgt de gebruiker alle geselecteerde combinaties van parameters waarmee de metingen gereproduceerd worden in een tabel. Bovendien wordt de variatie in berekende concentraties en berekende fluxen grafisch weergegeven. De variatie in concentraties die deel uitmaken van het GoF, is per definitie klein doordat die parameterinstellingen geselecteerd worden die de veldwaarnemingen zo goed mogelijk reproduceren. De variatie in fluxen kan veel groter zijn. Zo kan een bepaalde concentratie zowel het gevolg zijn van het verschil tussen twee kleine fluxen als van het verschil tussen twee grote fluxen.

De resultaten van de parameteranalyse vergroten het inzicht in de samenhang tussen het beschouwde watersysteem en het model. Daarnaast kunnen zij een maat geven voor de onzekerheid van de resultaten van maatregelen en scenario's. Waar de geselecteerde parameterinstellingen de 'huidige situatie' adequaat beschrijven, kunnen zij leiden tot een relevante maat voor de variatie in voorspelde concentraties.

## 3 Testopzet

### 3.1 Doel van de test

De verschillende onderdelen waaruit de module is opgebouwd zijn tijdens hun ontwikkeling getest op hun functionaliteit. Daarnaast is de functionaliteit van de module als geheel getest door gebruik van verschillende instellingen in het stuurbestand. Deze tests zijn uitgevoerd bij het samenstellen van de manual. Het gaat daarbij voornamelijk om de technische functionaliteiten, zoals de dimensionering van de modelberekening, dimensionering van parameters die fungeren in de methode van Price (aantal trekkingen, definitie van de kostenfunctie), het herstarten van een afgebroken procedure en de wijze waarop uitvoer wordt gegenereerd. Al deze zaken zijn vermeld in de handleiding behorend bij de module. De test die in dit rapport wordt beschreven is gericht op de reproductie van resultaten bereikt met SENECA in het kader van OPERAWES (Boderie en Ouboter, 1992 en 1993).

Zo goed als mogelijk is de parameteranalyse die met behulp van SENECA gevolgd is na het introduceren van modelvergelijkingen voor denitrificatie in de waterfase (Boderie en Ouboter, 1993) gereproduceerd.

### 3.2 Beschrijving testcase

Een beschrijving van de testcase is geheel ontleend aan Boderie en Ouboter (1993). Voor een uitvoeriger beschrijving wordt verwezen naar dit rapport.

In Tabel 3.1 zijn voor het zuurstof/stikstof-systeem relevante procesparameters weergegeven, tezamen met hun actuele waarde en, indien van toepassing, de definitie van de initiële hypercube voor de parameteranalyse. De symbolen voor de parameters zijn terug te vinden in de procesformuleringen weergegeven in Bijlage A.

Tabel 3.1 Gekozen ranges van bij de analyse beschouwde parameters (zie formuleringen in Bijlage A)

| 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                | $C_{BOD}$   |                      | 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 | $croxde$    | 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 die niet gevarieerd worden.

### 3.3 Verschillen tussen SENECA en de ontwikkelde module

De verschillen tussen SENECA en de DELWAQ parameter analyse module (DELWAQ-PAM) zijn terug te voeren op de keuze binnen SENECA om de methode van Price uit te breiden met additionele opties ten aanzien van de specificatie van het probleem, terwijl het uitgangspunt van de recente ontwikkeling is geweest om een zo eenvoudig mogelijke werkwijze te volgen.

In het kader van de uitgevoerde test zijn er drie aspecten die niet uit SENECA zijn overgenomen:

- De bijdrage aan de kostenfunctie per tijdsinterval en per variabele wordt in SENECA verder bewerkt; of het gemiddelde of het maximum over de gehele periode maakt onderdeel uit van de kostenfunctie. Bovendien wordt de bijdrage van iedere afzonderlijk variabele (die ieder afzonderlijk door verdere bewerking tot stand was gekomen) nog weer verder bewerkt; of het gemiddelde of de maximale waarde bepaalt de uiteindelijke kostenfunctie. In de recent ontwikkelde module wordt de kostenfunctie opgebouwd als sommatie van alle bijdragen per tijdsinterval en per variabele.
- In SENECA draagt het residu voor een tijdsinterval en voor een variabele niet bij aan de kostenfunctie als niet een (door de gebruiker op te geven) minimum aantal waarnemingen van een variabele binnen een tijdsinterval aanwezig is. In de DELWAQ-module draagt een tijdsinterval al bij aan de kostenfunctie als er één waarneming aanwezig is. Het is aan de gebruiker om de dataset te ontdoen van niet te reproduceren meetgegevens (bijvoorbeeld uitbijters).
- In de methode van Price wordt een nieuw te evalueren punt uit de parameterruimte bepaald door een random trekking van een aantal elementen uit de vase. Van deze verzameling wordt het zwaartepunt bepaald. Vervolgens wordt opnieuw een punt uit de vase getrokken. Dit punt wordt gespiegeld om het bepaalde zwaartepunt. Het resultaat van deze spiegeling levert het te evalueren punt uit de parameterruimte. Het aantal elementen dat ter bepaling van het zwaartepunt wordt getrokken is in SENECA variabel (mondelijke communicatie Van der Tol, RIKZ); het neemt toe als het proces van updaten van de vase vordert. Het idee erachter is dat bij trekking van een klein aantal een snellere, maar grovere convergentie plaatsvindt dan bij trekking van een groot aantal elementen. In de DELWAQ-module is het aantal elementen waarvoor het zwaartepunt wordt bepaald constant tijdens een procedure en door de gebruiker op te geven.

NB Op een aantal punten kent de in DELWAQ-kader ontwikkelde module een uitgebreidere functionaliteit dan SENECA. Deze uitbreidingen zijn voor de onderhavige test niet van belang. Voor een beschrijving van deze functionaliteit wordt verwezen naar het functioneel ontwerp (ten Brummelhuis en Ouboter, 1994) en de Gebruikershandleiding (ten Brummelhuis en Ouboter, 1995).

## 4 Resultaten test

De resultaten van de twee pakketten (SENECA en DELWAQ-PAM) zijn op verschillende manieren met elkaar te vergelijken. In Tabel 4.1 zijn de ranges van parameters in de resulterende hypercube weergegeven tezamen met de bereikte reductie ten opzichte van de initiële hypercube.

Tabel 4.1 Resultaten van de analyse

| Symb.       | Best <sup>1</sup> DELWAQ (SENECA) | Min DELWAQ (SENECA) | Max DELWAQ (SENECA) | Reductie DELWAQ (SENECA) |
|-------------|-----------------------------------|---------------------|---------------------|--------------------------|
| $K_L$       | 1.074 (1.064)                     | 0.9 (1.035)         | 1.3 (1.128)         | 0.0 (0.768)              |
| $RC_{NIT}$  | 0.224 (0.171)                     | 0.208 (0.150)       | 0.379 (0.192)       | 0.51 (0.879)             |
| $G_{NIT}$   | -0.999 (-0.865)                   | -0.999 (-0.999)     | -0.287 (-0.524)     | 0.29 (0.525)             |
| $RC_{BOI}$  | 0.061 (0.163)                     | 0.050 (0.146)       | 0.199 (0.190)       | 0.01 (0.709)             |
| $RC_{BODN}$ | 0.051 (0.031)                     | 0.034 (0.024)       | 0.093 (0.047)       | 0.25 (0.712)             |
| $RC_{DNB}$  | 0.043 (0.055)                     | 0.018 (0.040)       | 0.100 (0.075)       | 0.18 (0.647)             |
| $RC_{DNW}$  | 0.132 (0.027)                     | 0.000 (0.009)       | 0.238 (0.129)       | 0.21 (0.600)             |
| $k_f$       | 3.618 (2.180)                     | 1.442 (1.792)       | 4.599 (4.499)       | 0.12 (0.248)             |

<sup>1)</sup>: afgerond op 3 cijfers

Een aantal verschillen in resultaat tussen SENECA en DELWAQ valt op:

- De reductie in ranges, afgeleid als het complement van de range in de resulterende hypercube gedeeld door de range in de initiële hypercube, is onder SENECA veel groter dan in de DELWAQ-module. Tabel 4.2 laat echter zien dat dit niet geldt voor de alle uit de individuele parameters afgeleide 'overall' eerste-orde-afbraak-coëfficiënten, zoals die zijn bepaald voor een karakteristieke zomer- en een winterconditie voor zuurstof en temperatuur. De spreiding binnen de uit de vase afgeleide overall constanten voor met name denitrificatie in de bodem en nitrificatie blijkt geringer te zijn dan op grond van Tabel 4.1 verwacht kon worden. Overall constanten voor denitrificatie in het water en afbraak van BOD vertonen een eveneens grote spreiding.



- Volgens de onder DELWAQ gehanteerde definitie van de kostenfunctie wordt het resultaat van SENECA<sup>1</sup> verworpen. De range in 'goodness of fit' (GoF)-waarden die resulteert uit de DELWAQ-exercitie is 79.23 - 80.45. Het beste resultaat uit de SENECA-vase heeft een (zoals in DELWAQ gedefinieerd) GoF van 80.75. In Figuur 1 (a t/m g) zijn resultaten te zien van de beste SENECA-run en van de range in concentraties als resultaat van de DELWAQ-exercitie. Voor zover dit op het oog te beoordelen is lijken de DELWAQ-runs de metingen beter te reproduceren dan de beste SENECA-run. Tegelijk moet dan worden opgemerkt dat deze laatste ook een acceptabel resultaat had.

Tabel 4.2 Uit de vase afgeleide karakteristieken van eerste orde afbraakcoëfficiënten onder karakteristieke condities (zomer: zuurstof = 1 mg/l, temperatuur = 20 °C; winter: zuurstof = 5 mg/l, temperatuur = 7 °C).

| proces         | zomer/<br>winter | gemiddeld<br>DELWAQ (SENECA) | standaard-dev.<br>DELWAQ (SENECA) | volgens<br>SENECA (best) |
|----------------|------------------|------------------------------|-----------------------------------|--------------------------|
| K_nitrificatie | zomer            | 0.196 (0.129)                | 0.016 (0.011)                     | 0.135                    |
|                | winter           | 0.073 (0.046)                | 0.008 (0.003)                     | 0.046                    |
| K-DenWat       | zomer            | 0.006 (0.004)                | 0.005 (0.002)                     | 0.006                    |
|                | winter           | 0.000 (0.000)                | 0.000 (0.000)                     | 0.000                    |
| K-DenSed       | zomer            | 0.007 (0.006)                | 0.002 (0.001)                     | 0.005                    |
| K-DenTot       | zomer            | 0.014 (0.019)                | 0.006 (0.002)                     | 0.011                    |
|                | winter           | 0.007 (0.006)                | 0.002 (0.001)                     | 0.005                    |
| k-bodc         | zomer            | 0.075 (0.147)                | 0.032 (0.015)                     | 0.147                    |
|                | winter           | 0.032 (0.064)                | 0.014 (0.006)                     | 0.064                    |

<sup>1</sup>De beste parametercombinatie uit SENECA is doorgerekend met de DELWAQ-module door minimum en maximum uit de initiële hypercube gelijk te stellen aan de door SENECA gegeven parameterwaarde.

## 5 Conclusies

Het is met de voor DELWAQ ontwikkelde parameteranalysemodule mogelijk om dezelfde analyses uit te voeren als met de calibratiemodule van SENECA. De geconstateerde verschillen zijn terug te voeren op een klein verschil in de definitie van de kostenfunctie. De keuze van de definitie van de kostenfunctie is bepalend voor het eindresultaat.

Het bovenstaande geeft aan dat een toepassing van DELWAQ-PAM niet begint met het definiëren van de kostenfunctie, maar met het beschrijven van de fenomenen die door het waterkwaliteitsmodel zo goed mogelijk gerepresenteerd moeten worden op grond van de principes van de waterkwaliteit in het algemeen en van het specifieke systeemgedrag in het bijzonder. De module in zijn huidige vorm biedt een aantal mogelijkheden voor het opstellen van een kostenfunctie, gericht op het reproduceren van de individuele punten uit een dataset, of het reproduceren van gemiddelde concentraties in een tijdsvenster. Bij toekomstig gebruik is een uitbreiding gewenst met functionaliteit waarbij ook de representatie van trends in waterkwaliteitsvariabelen (in tijd en ruimte) vertaald kunnen worden in een term van de kostenfunctie.

## 6 Literatuur

- Ansink, J., ten Brummelhuis, P.G.J., Hogeweg, M. & Ouboter, M.R.L., 1995  
Parameter-analyse module ten behoeve van het LIFE-instrumentarium Schelde estuarium Detailontwerp, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T1496
- Boderie, P.M.A. & Ouboter, M.R.L., 1992  
Operationalisering van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, OPERAWES-nota 1a, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T941.
- Boderie, P.M.A. & Ouboter, M.R.L., 1993  
Operationalisering van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, Uitbreidingen procesformuleringen met denitrificatie waterkolom, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T1089.
- ten Brummelhuis, P.G.J. & Ouboter, M.R.L., 1994  
Parameter-analyse module ten behoeve van het LIFE-instrumentarium Schelde estuarium, Functioneel ontwerp, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T1496
- De Hoop, B.J., Herman, P.M.J., Scholten, H., Soetaert, K., 1992  
SENECA 2.0 manual, NIOO-CEMO
- Price, W.L., 1976  
A controlled random search procedure for global optimisation, The Computer Journal, Vol. 20, no 4, p367-370.
- WL, 1991  
Waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, SAWES-nota 91.01, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T257 (concept).

## **BIJLAGEN**

## Bijlage A Procesformuleringen naar Boderie en Ouboter (1993)

### Bodemdenitrificatie

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

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

$$g_N(O_2) = \frac{O_2 + \infty}{10 + \infty}$$
(1.1)

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> ) |

### Denitrificatie in de waterkolom

$$\frac{\partial(NO_3^-)}{\partial t} = -RC_{W DEN} \cdot (NO_3^-) \cdot f(T) \cdot g_N(O_2)$$
(1.2)

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

$$g_N(O_2) = 0 \quad \text{if } O_2 \geq \text{Croxde}$$

$$= \frac{(1 - O_2 / \text{Croxde})}{(1 + kf' \cdot O_2 / \text{Croxde})} \quad \text{if } O_2 < \text{croxde}$$

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

waarin:

|              |   |                                      |
|--------------|---|--------------------------------------|
| $NO_3^-$     | = nitraatconcentratie   | (mg.L <sup>-1</sup> )                |
| $RC_{W DEN}$ | = denitrificatiesnelheid in de waterkolom   | (d <sup>-1</sup> )                   |
| f(T)         | = standaard temperatuurfunctie  | (-)                                  |
| a            | = constante in de temperatuurfunctie  | (-)                                  |
| $g_N(O_2)$   | = zuurstoffunctie denitrificatie (waarde 0 tot 1)   | (-)                                  |
| croxde       | = kolomgemiddelde kritische zuurstofconcentratie waaronder denitrificatie plaatsvindt   | (mgO <sub>2</sub> .L <sup>-1</sup> ) |
| kf           | = kromming waarmee de zuurstoffunctie van 1 naar 0 afneemt. De expressie in kf' is toegepast om een linearisatie te benaderen ten behoeve van de exercities in SENECA | (-)                                  |

**Reaëratie**

$$\frac{\partial O_2}{\partial t} = \frac{K_L}{H} (O_{2, sat} - O_2) \quad (1.3)$$

waarin:

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

**Nitrificatie:**

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

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

$$g_N(O_2) = (1 - F_{NIT}) \cdot \left(\frac{O_2}{10}\right)^{10^{a-20}} + F_{NIT} \quad (1.4)$$

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**

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

$$f(T) = a^{(T-20)} \quad (1.5)$$

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

waarin:

|                                  |   |                                      |
|----------------------------------|---|--------------------------------------|
| BOD                              | = concentratie BOD  | (mg.L <sup>-1</sup> )                |
| RC <sub>BOD</sub>                | = afbraaksnelheid BOD   | (d <sup>-1</sup> )                   |
| f(T)                             | = standaard temperatuurfunctie  | (-)                                  |
| T                                | = temperatuur   | (°C)                                 |
| a                                | = constante in de temperatuurfunctie  | (-)                                  |
| g <sub>B</sub> (O <sub>2</sub> ) | = zuurstoffunctie voor BOD afbraak  | (-)                                  |
| 10                               | = zuurstofconcentratie waarbij de functie waarde 1.0 heeft  | (mgO <sub>2</sub> .L <sup>-1</sup> ) |
| F <sub>BOD</sub>                 | = functiewaarde in zuurstofloze toestand  | (-)                                  |
| G <sub>BOD</sub>                 | = krommingsfactor voor zuurstoffunctie, rechte lijn als G <sub>BOD</sub> = 0, maximale kromming bij G <sub>BOD</sub> = -1 | (-)                                  |

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

Formulering analoog aan formule 1.5 waarbij de afbraak snelheid van organisch stikstof de naam RC<sub>BODN</sub> heeft.

## Bijlage B Instellingen parameteranalysemodule gebruikt bij de test

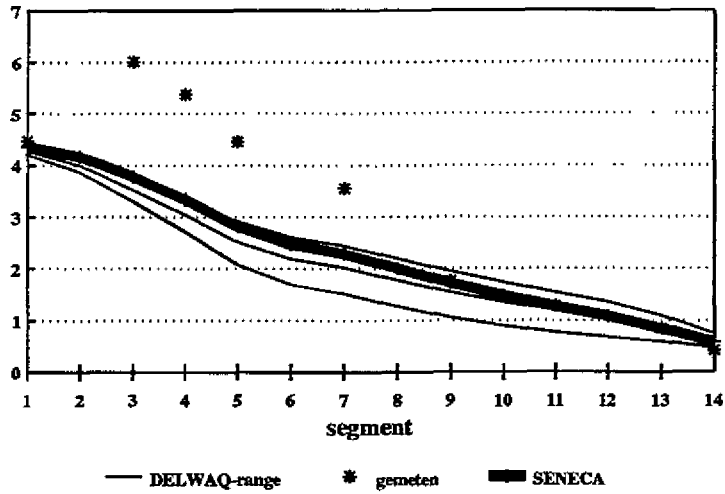
|  |  |       |             |            |      |     |     |              |
|--|--|-------|-------------|------------|------|-----|-----|--------------|
| TSTART, TSTOP, TDELTA  |  | 0     | 42          | 1          |      |     |     |              |
| Number of segments   |  | 14    |             |            |      |     |     |              |
| Name of delwaq input file  |  |       |             |            |      |     |     | 'delwaq.inp' |
| Name of measurements database  |  |       |             |            |      |     |     | 'nomay.pst'  |
| Type of scaling in GoF criterion   |  |       |             |            |      |     |     | 1            |
| Storage type : 1 = online, 2 = offline, 3 = no-store                               |  |       |             |            |      |     |     | 2            |
| Update of the vase : 1 = Price's method, 2 = vdTol option                          |  |       |             |            |      |     |     | 1            |
| Initialization: 0 = restart, 1 = latin hypercube sampling                          |  |       |             |            |      |     |     | 1            |
| Restart with different GoF: 0 = same GoF, 1 = different GoF                        |  |       |             |            |      |     |     | 0            |
| Representation of uncertainty : 1 = min-max hypercubes                             |  |       |             |            |      |     |     | 1            |
| Number of parameter combinations in the vase                                       |  |       |             |            |      |     |     | 50           |
| Number of parameters   |  |       |             |            |      |     |     | 8            |
| Number of random selections from the vase to determine a new parameter combination |  |       |             |            |      |     |     | 10           |
| Total number of updates of the vase  |  |       |             |            |      |     |     | 400          |
| Number of substances   |  | 4     |             |            |      |     |     |              |
| Name, Nwin, Exp, Wght, Absbnd, Relbnd  |  |       |             |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'NO3'       | 2          | 1.0  | 1.0 | 0.0 | 0.0          |
|  |  | 'NH4' | 2           | 1.0        | 1.0  | 0.0 | 0.0 |              |
|  |  | 'OXY' | 2           | 1.0        | 1.0  | 0.0 | 0.0 |              |
|  |  | 'pH'  | 2           | 1.0        | 1.0  | 0.0 | 0.0 |              |
| Number of processes/ fluxes  |  |       |             |            |      |     |     | 6            |
| Name   |  |       |             |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'dNitri'    |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'dDenitSed' |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'dDenitWat' |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'dREAROXY'  |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'dDecOON'   |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'dDecBODC'  |            |      |     |     |              |
| Parameter type, Name, Min, Max   |  |       |             |            |      |     |     |              |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'KLRear'   | 0.9  |     |     | 1.3          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'ReNit'    | 0.05 |     |     | 0.4          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'CurvNit'  | -1.0 |     |     | 0.0          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'RCBODC'   | 0.05 |     |     | 0.2          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'RCOON %'  | 0.02 |     |     | 0.1          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'RCDenSed' | 0.0  |     |     | 0.1          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'RCDenWat' | 0.0  |     |     | 0.3          |
|  |  |       | 'CONSTANT'  | 'Curvat'   | 1.0  |     |     | 4.6          |



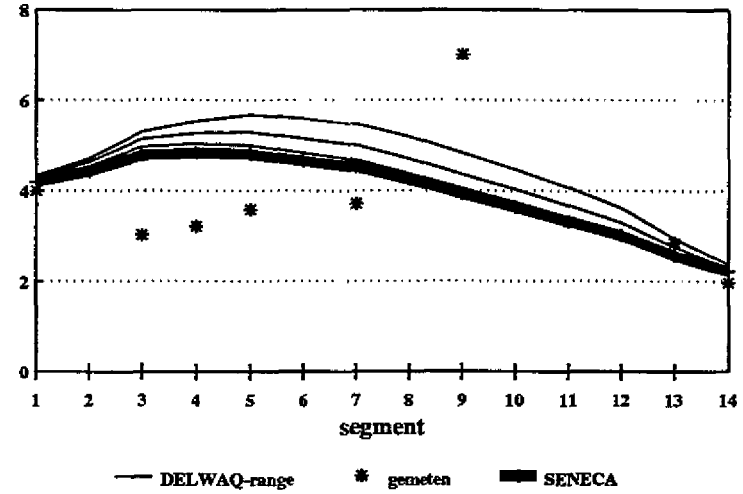
# FIGUREN

Figuur 1a

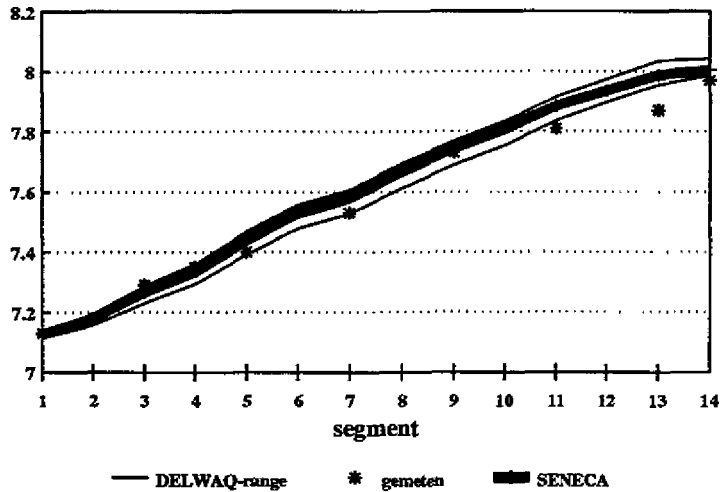
ammonium februari 1987



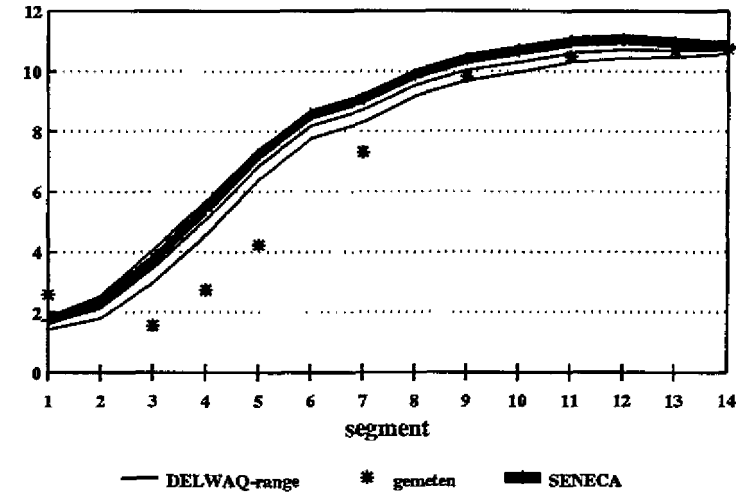
nitraat februari 1987



pH februari 1987

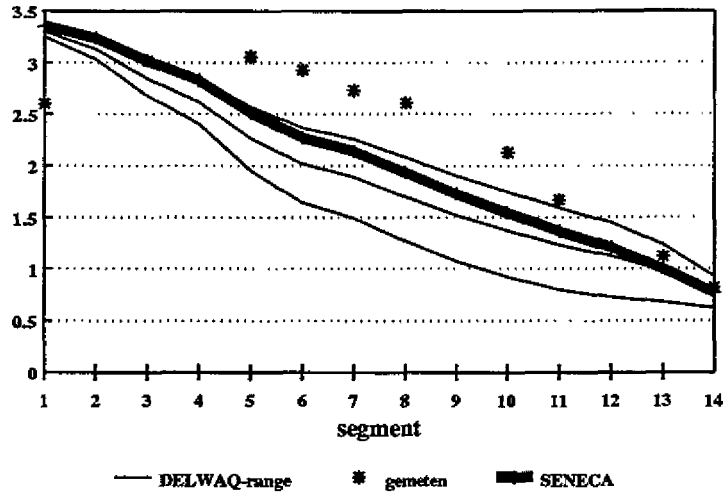


zuurstof februari 1987

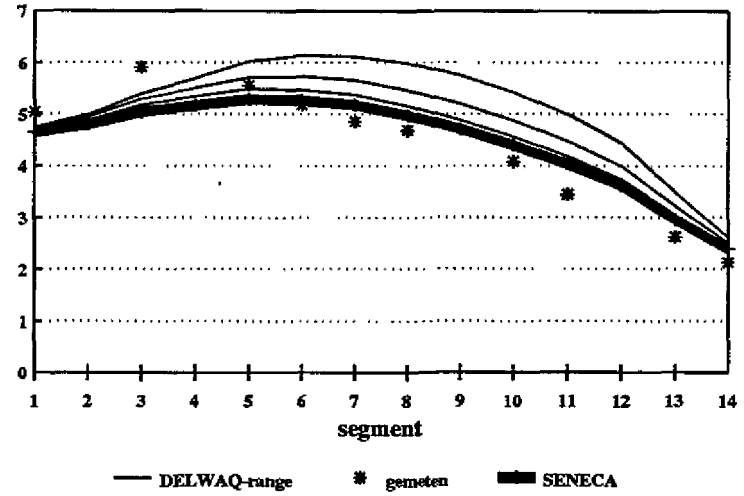


Figuur 1b

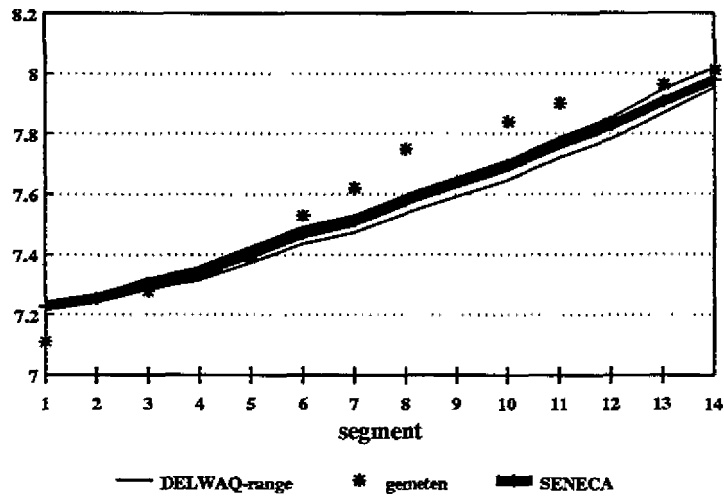
ammonium april 1987



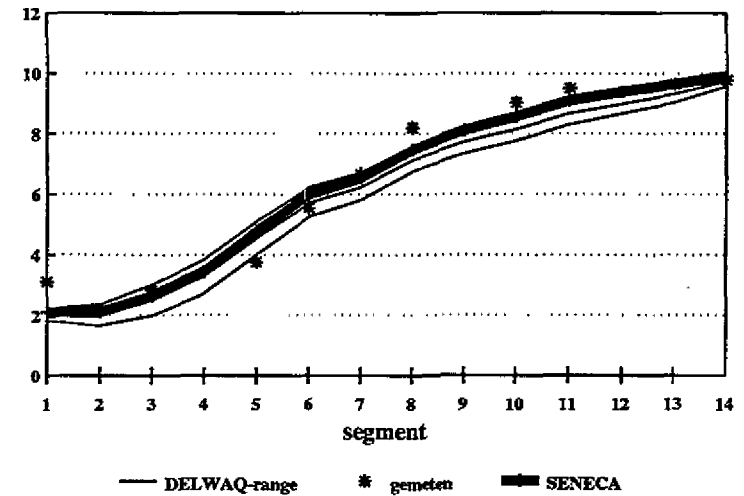
nitraat april 1987



pH april 1987

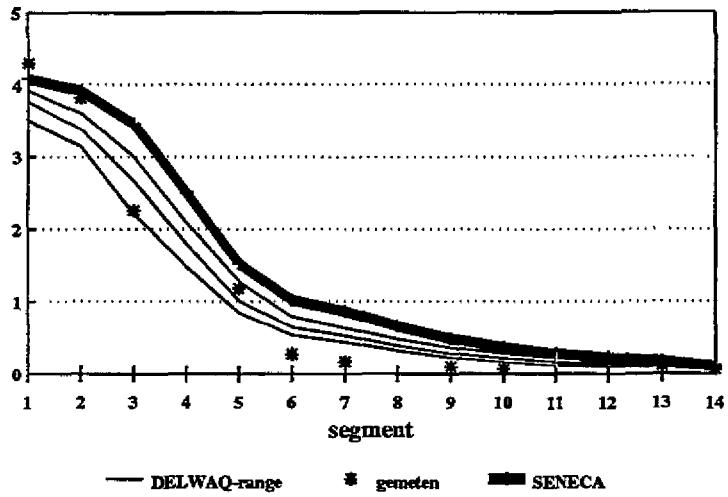


zuurstof april 1987

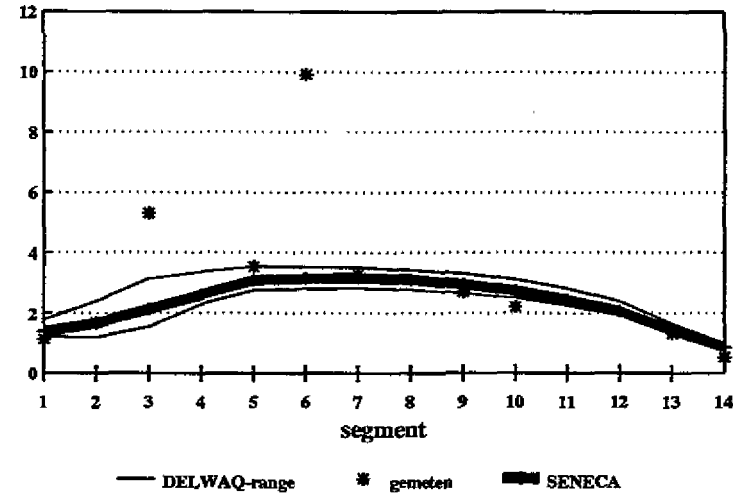


Figuur 1c

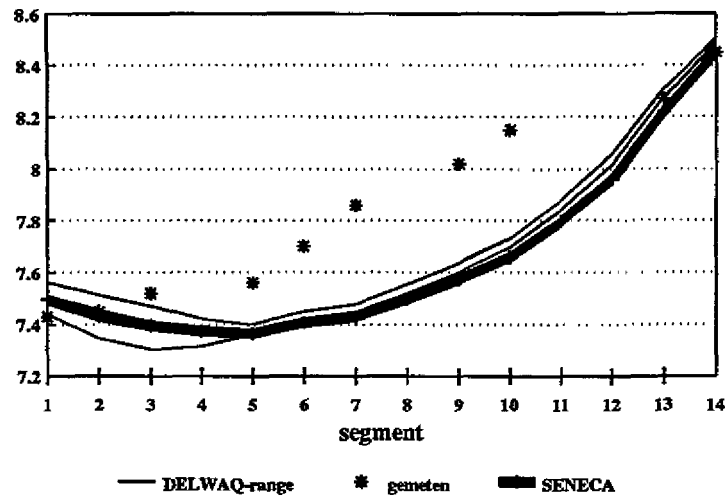
ammonium juli 1987



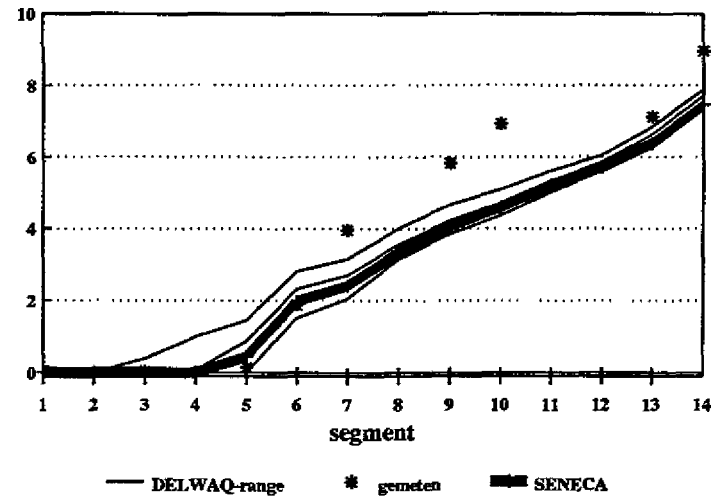
nitraat juli 1987



pH juli 1987

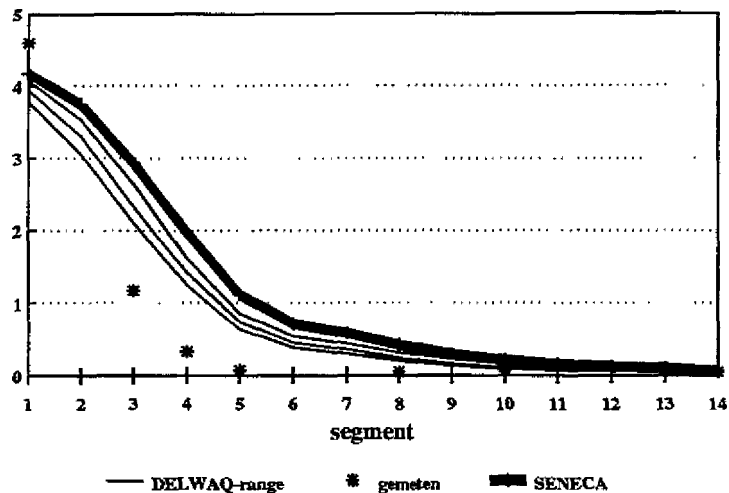


zuurstof juli 1987

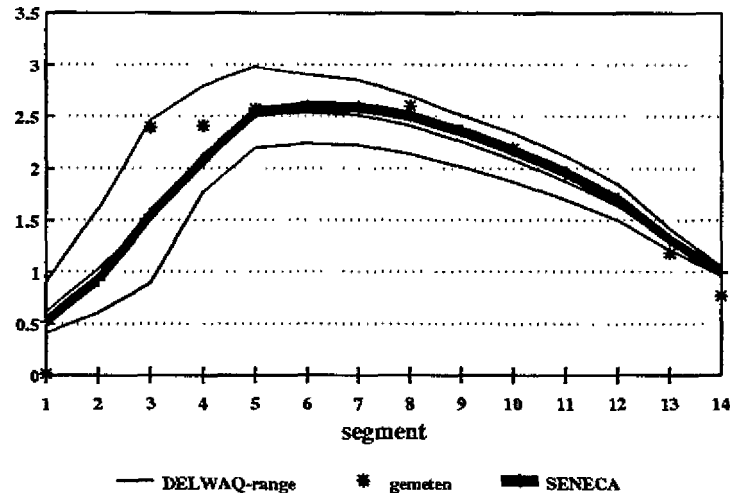


Figuur 1d

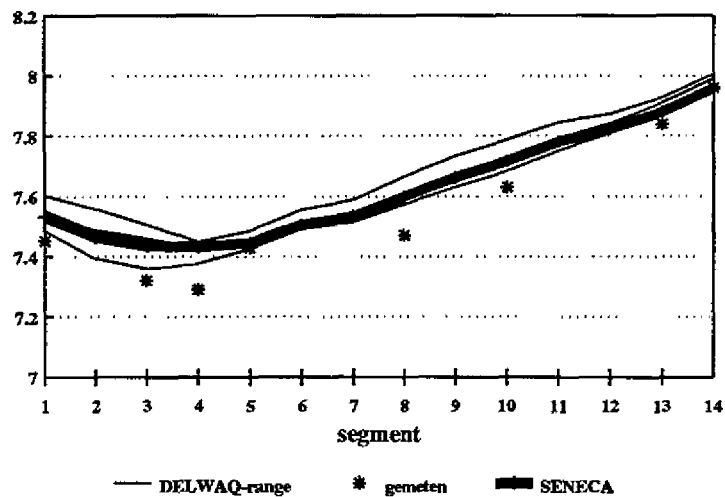
ammonium augustus 1987



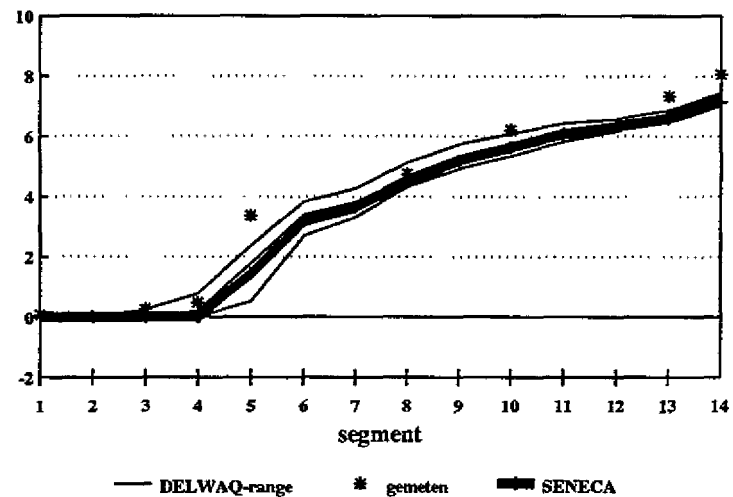
nitraat augustus 1987



pH augustus 1987

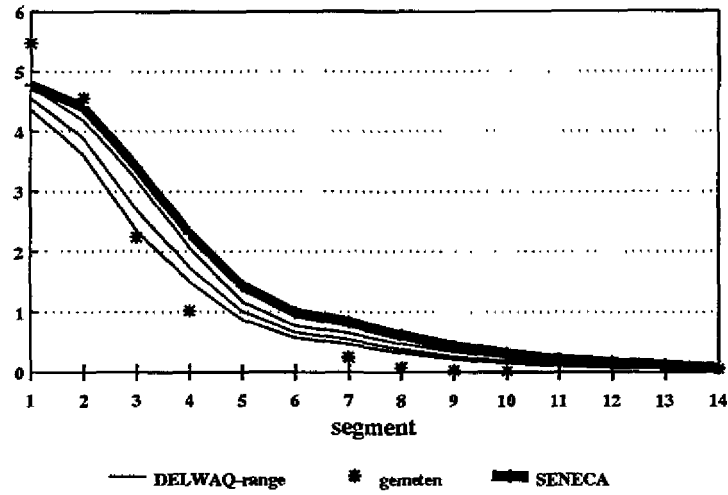


zuurstof augustus 1987

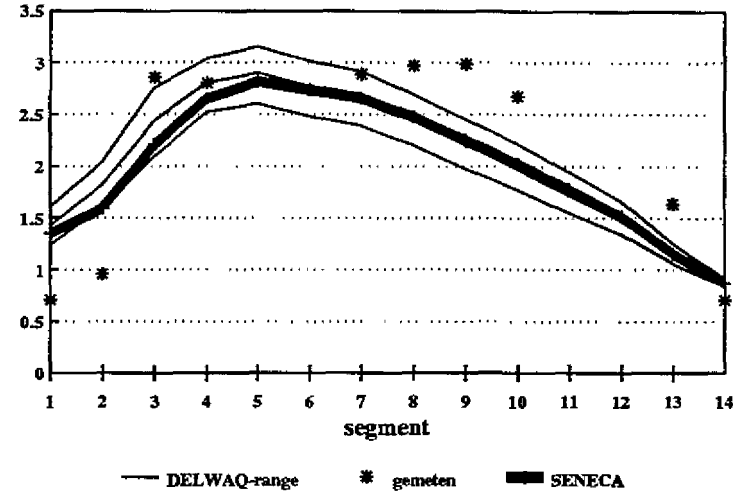


Figuur 1e

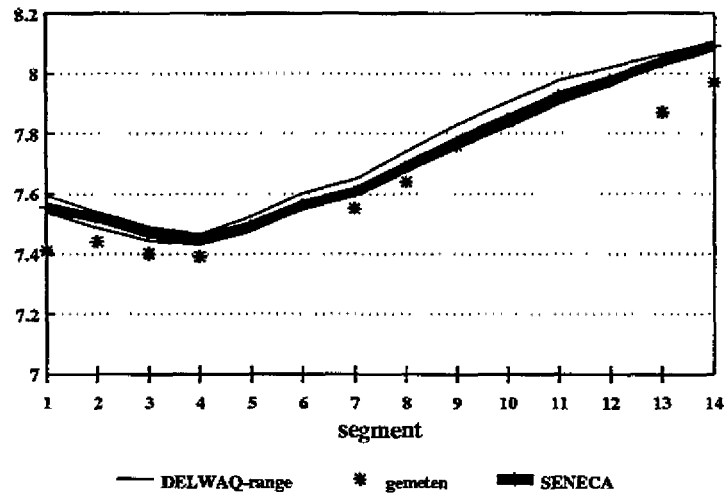
ammonium oktober 1987



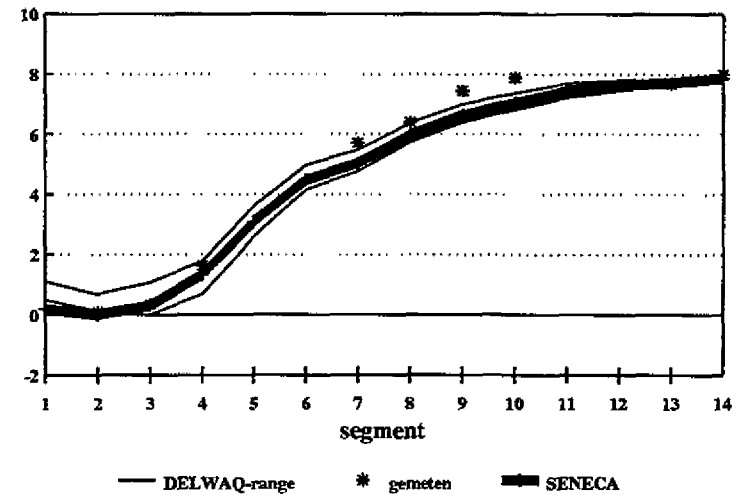
nitraat oktober 1987



pH oktober 1987

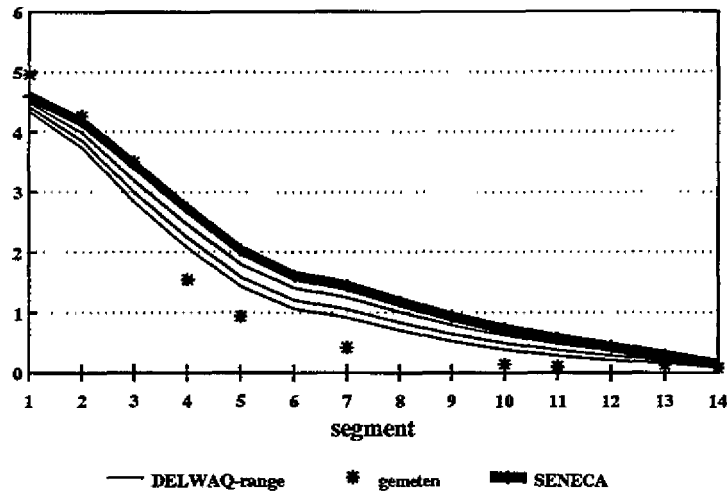


zuurstof oktober 1987

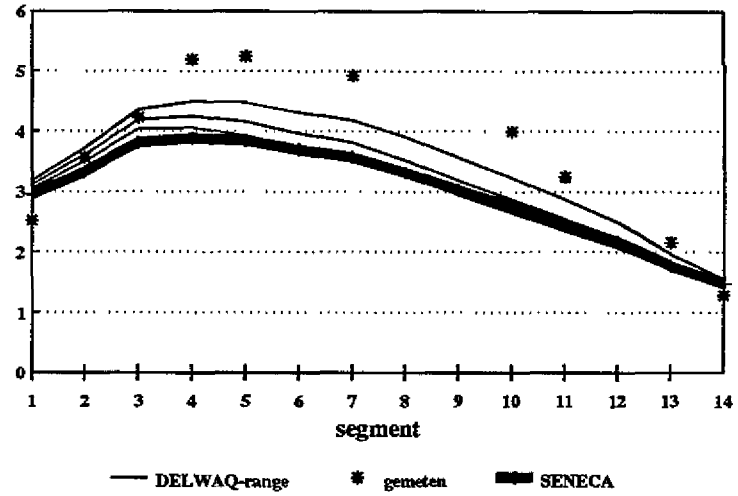


Figuur 1f

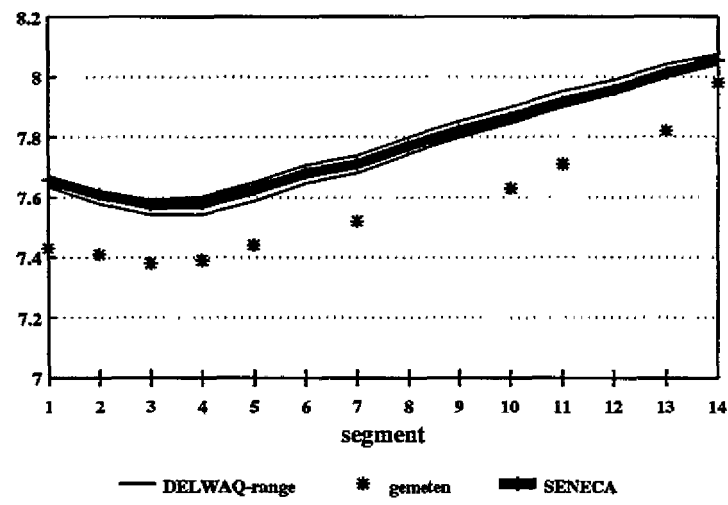
ammonium december 1987



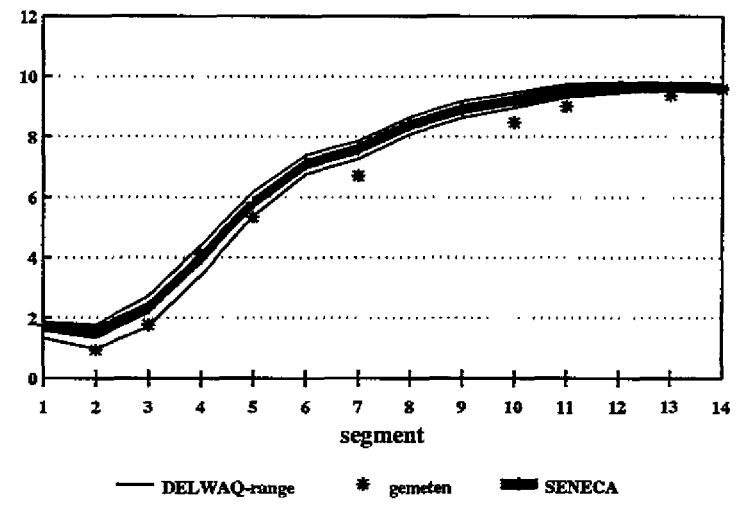
nitraat december 1987



pH december 1987

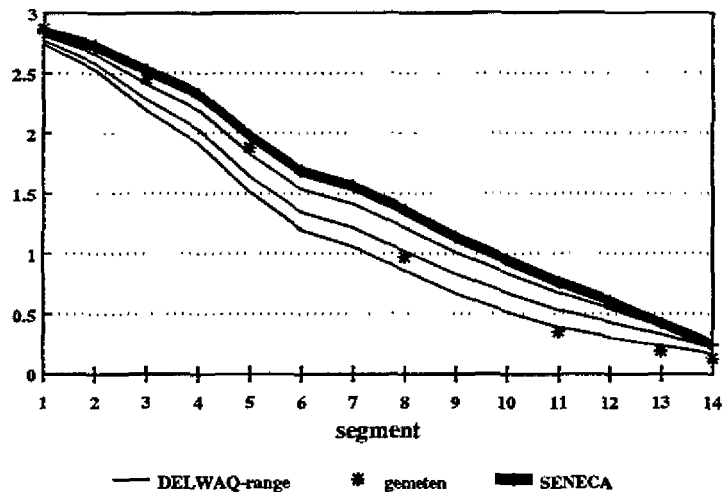


zuurstof december 1987

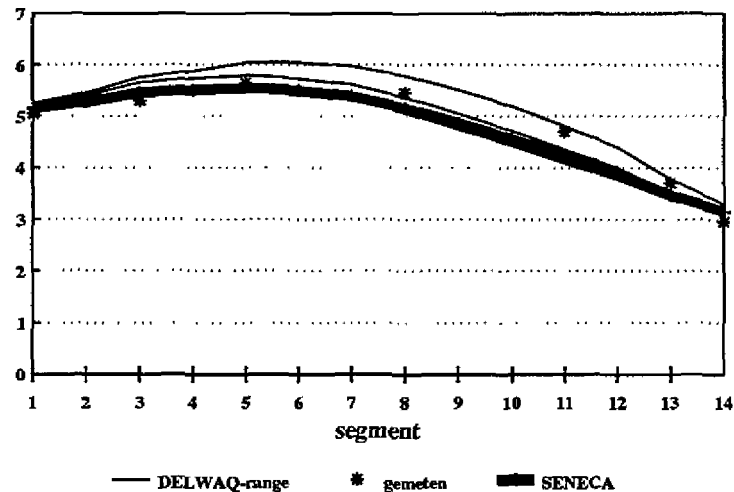


Figuur 1g

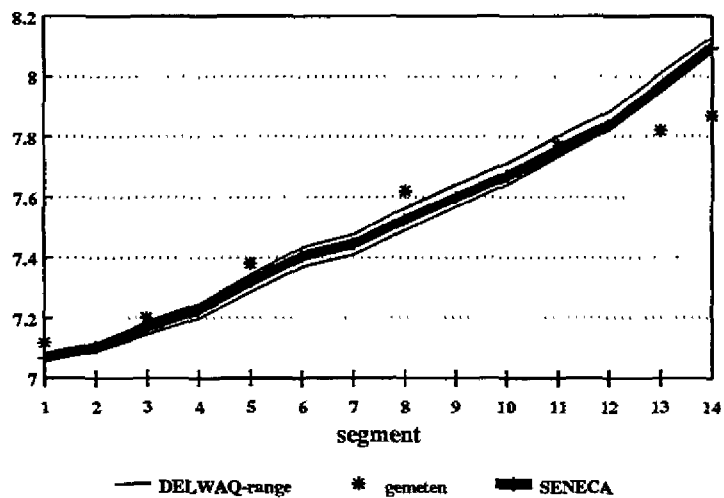
ammonium februari 1988



nitraat februari 1988



pH februari 1988



zuurstof februari 1988

