



Rijksinstituut voor kust en zee/RIKZ

De operationalisatie van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium

B.J. Kater

rapport RIKZ-94.006

februari 1994

Inhoudsopgave

	Samenvatting	4
1	Inleiding	5
1.1	Het waterkwaliteitsmodel	5
1.2	Het gemodelleerde gebied en de modelschematisatie	6
2	De ontwikkeling van de waterkwaliteitsmodellen	7
2.1	Het waterkwaliteitsmodel voor zuurstof, stikstof en zware metalen	7
2.2	Fytoplanktonmodellering	8
2.3	Het waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen	8
2.4	Database	8
3	De gemodelleerde processen	9
3.1	Processen waterkwaliteitsmodel voor zuurstof en stikstof	9
3.2	Processen fytoplanktonmodel	11
3.3	Processen waterkwaliteitsmodel voor zware metalen	12
3.4	Processen waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen.	12
4	De operationalisatie en verbetering van het model.	15
4.1	Gebruikersvriendelijkheid	15
4.1.1	Modelinvoer	15
4.1.2	Modeluitvoer	15
4.2	Calibratieprocedure en de betrouwbaarheid van modelresultaten	16
4.3	De slibbalans	17
4.4	Procesformuleringen	17
4.4.1	Denitrificatie in de waterfase	17
4.4.2	Zuurstoffunctie	18
4.5	Handleiding	19
5	Simulaties van periodes uit het verleden.	20
5.1	Effect verhoogde lozing van één stof op één lokatie	20
5.1.1	Aanleiding	20
5.1.2	Methode	20
5.1.3	Resultaten	20
6	Scenario's	23
6.1	Draaien van scenario's	23
6.2	Reducties van 0%, 25%, 50%, 75% en 100%	24
6.2.1	Opzet scenario's	24
6.2.2	Resultaten zuurstof en stikstof huishouding	24
6.2.3	Resultaten zware metalen	26
7	Beperkingen van het model	30
7.1	Partitiecoëfficiënt	30
7.2	Alkaliteit	32
7.3	Slibtransport	32
7.4	Ammonium-nitraat verhouding	32
7.5	Waterbodem	32



Directoraat-Generaal Rijkswaterstaat

Rijksinstituut voor Kust en Zee/RIKZ

Aan
Rijkswaterstaat
RIKZ (SIC)
L. Withagen
Postbus 8039
4330 EA Middelburg

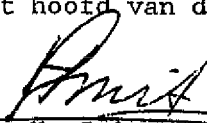
Contactpersoon
B.J. Kater
Datum
31 oktober 1994
Ons kenmerk
RIKZ/AB-94.60129
Project
OPERAWES
Onderwerp
Aanbieding rapport RIKZ-94.006

Doorkiesnummer
01180-72299
Bijlage(n)
1
Uw kenmerk
-

Hierbij bied ik U het rapport "De operationalisatie van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium" aan. Het rapport beschrijft de operationalisatie van het model en laat aan de hand van een aantal voorbeelden de mogelijkheden van het model zien. Ook aan de beperkingen van het model is aandacht besteed. Het model wordt ingezet als hulpmiddel bij beleidsadvisering, bijvoorbeeld voor de analyses voor watersysteemverkenningen.

In de toekomst wordt met het model het effect van een aantal ingrepen (zoals het reduceren van lozingen en het saneren van de bodem van de Zeeschelde) op de waterkwaliteit doorgerekend. Daarnaast zal het model worden uitgebreid met een module voor ecotoxicologische risico-analyse. Tenslotte zal het model worden gecalibreerd op recente meetgegevens. In internationaal kader wordt momenteel het zogenaamde LIFE-instrumentarium ontwikkeld. Dit zijn waterkwaliteitsmodellen voor het Schelde stroomgebied in een gebruikersvriendelijke schil. De functionaliteiten van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium zullen in het LIFE-model Schelde-estuarium worden opgenomen. Het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium zal voor intern gebruik bij beleidsadvisering beschikbaar zijn, totdat het LIFE-model Schelde-estuarium opgeleverd is.

Hoogachtend,
de hoofdingenieur-directeur,
namens deze,
het hoofd van de afdeling Advies en Beleidsanalyse Delta,


ir. H. Smits

Vestiging Middelburg
Postbus 8039, 4330 EA Middelburg
Bezoekadres Grenadierweg 31

Telefoon 01180-72200
Telefax 01180-16500

8	Automatische calibratie	33
8.1	Inleiding	33
8.2	Beste fit	33
9	Toekomst perspectief	35
9.1	Calibratie op recente meetgegevens	35
9.2	Onzekerheidsanalyses	35
9.3	Beleidsscenario's	35
9.4	Watersysteemverkenningen	36
10	Conclusie	37
11	Literatuur	38

Samenvatting

In het project OPERAWES is het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium geoperationaliseerd tot een bruikbaar hulpmiddel bij beleidsvoorbereiding en -advies. Het geoperationaliseerde model berekent de waterkwaliteit uit opgegeven belastingen voor stoffen uit de zuurstofcyclus, voor stoffen uit de stikstofcyclus, voor fytoplankton, voor zware metalen en voor organische microverontreinigingen. Om het model operationeel te maken zijn diverse computer-programma's ontwikkeld en aan het model toegevoegd. Het model is gekoppeld aan het programmapakket SENECA, waarmee het uitvoeren van automatische calibraties en onzekerheidsanalyses mogelijk geworden is. Aan het model is een nieuwe, verbeterde, slibbalans toegevoegd. De denitrificatie is gesplitst in denitrificatie in de bodem en denitrificatie in de waterfase. Als laatste is de zuurstoffunctie van diverse processen verbeterd.

Met het model kunnen simulaties van voorbije perioden worden uitgevoerd, waarna verschillende situaties met elkaar vergeleken kunnen worden. Een andere mogelijkheid is het uitvoeren van belastingreductie-scenario's. Het model doet daarbij voorspellingen over de te verwachte waterkwaliteit bij een veronderstelde belastingreductie.

Zoals ieder model kent ook het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium zijn beperkingen. Er wordt voortdurend gewerkt aan het verminderen van deze beperkingen. In de toekomst zal het model opnieuw gecalibreerd worden op recente meetgegevens, zullen onzekerheidsanalyses worden uitgevoerd, zullen diverse modelberekeningen met belastingreducties uitgevoerd worden, en zal het model voor watersysteemverkenningen ingezet worden.

1 Inleiding

In juni 1991 werd bij de toenmalige Dienst Getijdewateren (nu Rijksinstituut voor Kust en Zee) het project OPERAWES gestart. Doel van dit project was het operationeel maken van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium tot een bruikbaar hulpmiddel waarmee analyses (zowel "terugkijkende" als "vooruitblikkende") kunnen worden uitgevoerd ten behoeve van beleidsvoorbereiding en beleidsadvisering. Deze analyses hebben betrekking op de relatie tussen de emissies van verontreinigingen en de concentraties in water, bodem en organismen in het Schelde-estuarium (Kater, 1991). Dit rapport handelt over de operationalisering van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium en de toepassingsmogelijkheden van het model.

In deze inleiding wordt verder aandacht besteed aan het model en het gebied dat het model beslaat. In het tweede hoofdstuk wordt de ontwikkeling van het model beschreven, terwijl hoofdstuk drie de gemodelleerde processen van het waterkwaliteitsmodel behandelt. Hoofdstuk vier licht toe op welke wijze het model verbeterd en geoperationaliseerd is. Hoofdstuk vijf tot en met acht handelen over diverse toepassingen van het geoperationaliseerde model. Hoofdstuk vijf geeft een aantal voorbeelden van simulaties van perioden in het verleden, terwijl hoofdstuk zes ingaat op vijf toekomstscenario's. Hoofdstuk zeven gaat in op de beperkingen van het model. In hoofdstuk acht wordt een voorbeeld van automatische calibratie gegeven. Hoofdstuk negen geeft aan welke verdere acties in de toekomst met het model ondernomen gaan worden. Hoofdstuk tien tenslotte geeft enkele conclusies met betrekking tot de operationalisatie van het model weer.

1.1 Het waterkwaliteitsmodel

Het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium bestaat uit twee modellen, namelijk een waterkwaliteitsmodel voor zuurstof, stikstof en zware metalen, en een waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen.

De modellen zijn te beschouwen als onderzoeksmodellen, dat wil zeggen dat het accent van de modellen en de modelontwikkeling vooral ligt bij onderzoeksdoelen, en niet bij beleidsadvisering. De modellen zijn ontwikkeld ter onderbouwing van en in vervolg op het beleidsplan Westerschelde.

De onderzoeksmodellen zijn te gebruiken bij beleidsonderbouwing en beleidsadvisering ten aanzien van de Westerschelde. Om deze toepassing mogelijk te maken zijn aanvullingen en verbeteringen nodig. Deze aanvullingen en verbeteringen hebben vooral betrekking op de gebruikersvriendelijkheid, de calibratie procedure, de betrouwbaarheid van de modelresultaten en de interfaces voor koppeling aan andere modellen en databases (Kater, 1991).

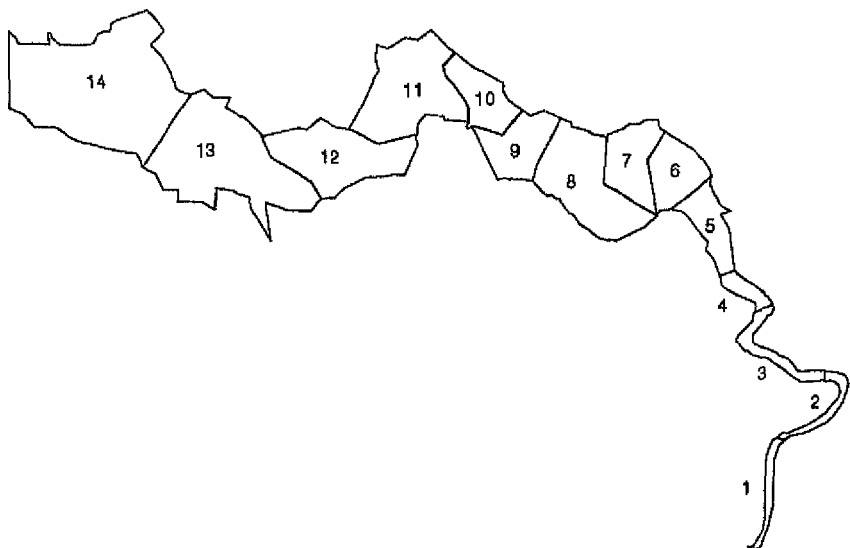
1.2 Het gemodelleerde gebied en de modelschematisatie

Het model beslaat het gebied tussen de lijn Vlissingen-Breskens en de plaats waar de Rupel de Schelde instroomt bij de Belgische plaats Rupelmonde. Om modelleren van dit gebied mogelijk te maken is het estuarium verdeeld in een veertiental homogeen veronderstelde modelcompartimenten. De grenzen van deze modelcompartimenten zijn weergegeven in tabel 1.1. Figuur 1.1 geeft een geschematiseerd overzicht van de verdeling van het gebied in modelcompartimenten.

Tabel 1.1

De grenzen van de veertien modelcompartimenten van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium.

comp.	gebied
1	Rupelmonde - Burcht
2	Burcht - Oosterweel
3	Oosterweel - Meestooft
4	Meestooft - Lillo
5	Lillo - grens
6	grens - Bath
7	Bath - Zimmerman
8	Zimmerman - Baalhoek
9	Baalhoek - Perkpolder
10	Perkpolder - Hansweert
11	Hansweert - Ossensisse
12	Ossensisse - Griete
13	Griete - Hoofdplaat
14	Hoofdplaat - Vlissingen



Figuur 1.1 Schematisatie waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium.

2 De ontwikkeling van de waterkwaliteitsmodellen

2.1 Het waterkwaliteitsmodel voor zuurstof, stikstof en zware metalen

Het waterkwaliteitsmodel is ontwikkeld door het Waterloopkundig Laboratorium te Delft. Een volledige beschrijving van de ontwikkeling van het model wordt gegeven in WL (1991a). Het doel van het model is om uit opgegeven belastingen op het estuarium de waterkwaliteit vast te stellen.

De gemodelleerde stoffen zijn stoffen uit de zuurstofhuishouding: zuurstof, zuurstofbinding door afbraak organisch koolstof (BOD), zuurstofbinding door afbraak van organisch stikstof (BODN); stoffen uit de stikstofhuishouding: organisch stikstof, ammonium, nitraat; en de zware metalen: cadmium, koper, zink en chroom.

Het model is een één-dimensionaal, deterministisch en dynamisch model. De gebruikte modelformuleringen zijn gebaseerd op de advectie-diffusievergelijking, die het transport van opgeloste stoffen weergeeft. De waterbeweging in het model is getijgemiddeld en het effect van het getij op de verspreiding van stoffen wordt weergegeven door de dispersiecoëfficiënt. Het transport van particulaire stoffen is gemodelleerd, gebruikmakend van bekend veronderstelde netto, seizoensgemiddelde, transporten van slib.

De modellering van waterkwaliteitsprocessen vindt plaats aan de hand van bron- en puttermen in de advectie-diffusievergelijking, met name voor de zuurstof- en stikstofhuishouding en voor de fytoplanktonmodellering (§ 2.2). Deze processen verlopen op tijdschalen die vergelijkbaar zijn met, of groter zijn dan, die van het transport. Processen die zich op veel kleinere tijdschalen afspelen, met name de adsorptie en desorptie van zware metalen aan zwevend materiaal, worden gemodelleerd met een chemisch evenwichtsmodel. De koppeling van dit model aan de advectie-diffusievergelijking maakt het mogelijk instantaan (met een oneindig hoge processnelheid) hoeveelheden van een gemodelleerde stof over te laten gaan in andere hoeveelheden.

Het basisprincipe van het model vormt het programma DELWAQ (DELft WATER Quality: WL, 1988). DELWAQ is een numeriek waterkwaliteitsmodel. Het vervult twee functies in het waterkwaliteitsmodel Westerschelde (WL, 1991a):

- a. DELWAQ berekent op numerieke wijze het transport van stoffen als gevolg van waterbewegingen en lozingen.
- b. DELWAQ vormt een 'kapstok' voor stukken programmatuur waarin fysische, chemische en biologische processen worden beschreven. Het chemisch evenwicht model dat gebruikt wordt is CHARON (WL, 1990a). Uitgaande van bepaalde hoeveelheden chemische componenten wordt, gegeven de omgevingstemperatuur, bepaald in welke hoeveelheid bepaalde verbindingen aanwezig zullen zijn. De door CHARON berekende evenwichtstoestand voldoet aan de wet van behoud van massa en aan de hoofdwetten van de thermodynamica.

2.2 Fytoplanktonmodellering

Fytoplankton is in het model opgenomen omdat het een significante invloed kan hebben op de zuurstof- en stikstofhuishouding. Verder kan de aanwezigheid van fytoplankton een verhoging van de pH tot gevolg hebben (WL, 1991a).

De algenmodellering is uitgevoerd met behulp van het programma DYNAMO (WL, 1989). DYNAMO onderscheidt twee fytoplanktongroepen: diatomeeën en overige algen. De fytoplanktodynamiek wordt beschreven als een functie van licht, temperatuur en beschikbaarheid van nutriënten.

2.3 Het waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen

Organische microverontreinigingen vertonen een ander gedrag dan zware metalen, waardoor het niet mogelijk was de zware metalen en organische microverontreinigingen in één model onder te brengen. Het model voor organische microverontreinigingen is ontwikkeld bij het Rijksinstituut voor Kust en Zee. De rapportage van de ontwikkeling moet nog plaats vinden. Het doel van dit model is eveneens om uit opgegeven belastingen op het estuarium de waterkwaliteit vast te stellen. De gemodelleerde stoffen zijn de polychloorbifenylen PCB-52 en PCB-153, de polyaromatische koolwaterstoffen benzo(a)pyreen en fluorantheen en het bestrijdingsmiddel lindaan (γ -HCH).

Ook het waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen is een ééndimensionaal, deterministisch en dynamisch model. De verspreiding van organische stoffen is gemodelleerd met behulp van het programma IMPAQT (WL, 1990b).

2.4 Database

Het model wordt gevoed met een database met emissie- en immissiegegevens. De emissiegegevens zijn gerangschikt per lozingspunt. De immissiegegevens zijn per meetpunt in het estuarium weergegeven. De gebruikte belastingen zijn uit de periode 1980-1988 (Holland et al., 1991; Wattel & Schouwenaar, 1991), die in 1993 zijn aangevuld met de belasting over de periode 1989-1991 (Schouwenaar, 1993; Lefevre, 1994).

Wanneer de database wordt uitgebreid met nieuwe jaren vereist dit ook enige aanpassingen aan het model. Diverse invoerfiles moeten worden aangepast. Een overzicht van alle aanpassingen aan het model wanneer de database wordt uitgebreid is gegeven door Schouwenaar & Kater (1993).

3 De gemodelleerde processen

3.1 Processen waterkwaliteitsmodel voor zuurstof en stikstof

De volgende formules geven een overzicht van gemodelleerde waterkwaliteitsprocessen (WL, 1991a, van Gils et al., 1993).

Reëratie

Reëratie is de uitwisseling tussen de atmosfeer en het oppervlaktewater. Het is het resultaat van over- of onderverzadiging van het water met zuurstof en kooldioxide.

$$\frac{\partial O_2}{\partial t} = \frac{K_L (O_{2,SAT} - O_2)}{H} \quad (3.1)$$

$$O_{2,SAT} = \frac{(0,680 - 6 \cdot 10^{-4} \cdot T) \cdot (755,4 - 0,032 \cdot T^2) \cdot (1 - 9 \cdot 10^{-6} \cdot Cl^-)}{(T + 35)} \quad (3.2)$$

waarin:

O_2	:	zuurstofconcentratie	$[mg \cdot l^{-1}]$
H	:	gemiddelde waterdiepte	$[m]$
K_L	:	reëratiecoëfficiënt	$[m \cdot d^{-1}]$
$O_{2,SAT}$	:	verzadigingsconcentratie zuurstof	$[mg \cdot l^{-1}]$
T	:	temperatuur	$[^{\circ}C]$
Cl^-	:	chloride concentratie	$[g \cdot l^{-1}]$

Nitrificatie

Nitrificatie is het microbiologische proces waarbij ammonium wordt omgevormd in nitraat. Dit gebeurt met een tussenstap waarin onder andere nitriet wordt gevormd. De nitrificatie reactie verbruikt zuurstof.

$$\frac{\partial (NH_4^+)}{\partial t} = -RC_{NIT}(NH_4^+) \cdot f(T) \cdot g(O_2) \quad (3.3)$$

$$f(T) = a^{(T-20)} \quad (3.4)$$

$$g(O_2) = \frac{(O_2 + d)}{(b + d)} \quad (3.5)$$

waarin:

NH_4^+	:	ammoniumconcentratie	$[mg \cdot l^{-1}]$
t	:	tijd	$[d]$
RC_{NIT}	:	nitrificatiesnelheid	$[d^{-1}]$
$f(T)$	:	temperatuurfunctie	$[-]$
T	:	temperatuur	$[^{\circ}C]$
a	:	constante in temperatuurfunctie	$[mg \cdot l^{-1}]$
$g(O_2)$	:	zuurstoffunctie	$[-]$
b	:	constante in zuurstoffunctie	$[mg \cdot l^{-1}]$
d	:	constante in zuurstoffunctie	$[mg \cdot l^{-1}]$

Denitrificatie

Bij de denitrificatie reactie wordt nitraat omgezet in stikstofgas, wat verdwijnt uit het systeem. Deze reactie vindt voornamelijk plaats onder zuurstofloze condities.

$$\frac{\partial (NO_3^-)}{\partial t} = \frac{-RC_{DENIT} \cdot (NO_3^-)}{H} \quad (3.6)$$

waarin

NO_3^-	:	nitraatconcentratie	$[mg \cdot l^{-1}]$
t	:	tijd	$[d]$
RC_{DENIT}	:	denitrificatiesnelheid	$[m \cdot d^{-1}]$
H	:	gemiddelde waterdiepte	$[m]$

Afbraak van organisch koolstof (BOD-afbraak)

De hoeveelheid afbreekbaar organisch koolstof wordt bepaald door experimenteel het zuurstofverbruik van een watermonster te meten. Dit zuurstofverbruik wordt aangeduid als BOD (Biological Oxygen Demand). Bij de bepaling van BOD worden zeer uiteenlopende verbindingen afgebroken. Verschillende typen stoffen hebben elk hun eigen afbraaksnelheid. De BOD wordt beschreven met een eerste orde vergelijking, die wordt beïnvloed door temperatuur en zuurstofgehalte:

$$\frac{\partial (BOD)}{\partial t} = -RC_{BOD} \cdot (BOD) \cdot f(T) \cdot g(O_2) \quad (3.7)$$

waarin:

BOD	:	BOD concentratie	$[mg \cdot l^{-1}]$
t	:	tijd	$[d]$
RC_{BOD}	:	afbraaksnelheid BOD	$[d^{-1}]$
$f(T)$	:	temperatuurfunctie	
$g(O_2)$	:	zuurstoffunctie	

De temperatuurfunctie en zuurstoffunctie zijn van hetzelfde type als bij nitrificatie. Zie aldaar voor de verklaring.

Afbraak van organisch stikstof (BODN-afbraak)

De hoeveelheid afbreekbaar organisch stikstof wordt ook bepaald door experimenteel het zuurstofverbruik van een watermonster te meten. Dit zuurstofverbruik wordt aangeduid als BODN (Biological Oxygen Demand Nitrogen). De snelheid van afbraak van BODN wordt beschreven met een eerste orde vergelijking, en wordt beïnvloed door temperatuur en zuurstofgehalte:

$$\frac{\partial (BODN)}{\partial t} = -RC_{BODN} \cdot (BODN) \cdot f(T) \cdot g(O_2) \quad (3.8)$$

waarin:

BODN	:	BODN-concentratie	$[mg \cdot l^{-1}]$
t	:	tijd	$[d]$
RC_{BODN}	:	afbraaksnelheid BODN	$[d^{-1}]$
$f(T)$	:	temperatuurfunctie	
$g(O_2)$	:	zuurstoffunctie	

De temperatuurfunctie en zuurstoffunctie zijn van hetzelfde type als bij nitrificatie. Zie aldaar voor de verklaring.

3.2 Processen fytoplanktonmodel

Overige algen

$$\frac{\partial \text{OVERALG}}{\partial t} = \frac{(\text{PROD}_A - \text{MORT}_1) * 1000}{\text{CF}_A} \quad (3.9)$$

waarin:

t	:	tijd	[s]
OVERALG	:	concentratie overige algen	[$\mu\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$]
PROD _A	:	netto productiesnelheid	[$\mu\text{g} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{l}^{-1}$]
MORT ₁	:	mortaliteit overige algen	[$\mu\text{g} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{l}^{-1}$]
CF _A	:	conversie factor tussen koolstof en chlorofyl-A voor overige algen	[-]

De netto productiesnelheid is het verschil tussen de bruto productiesnelheid en de respiratie. Respiratie is opgesplitst in onderhoudsrespiratie (afhankelijk van de biomassa) en groeirespiratie (afhankelijk van de bruto productiesnelheid). De bruto productiesnelheid wordt opgebouwd uit drie termen, namelijk: efficiëntie, primaire productie en een nutriëntlimitatie functie. De efficiëntie is hierbij, *proportioneel aan de daglengte, gedeeld door de daglengte waarbij de groei "verzadigd" raakt*. De primaire productie wordt berekend door de primaire productie bij 20°C te vermenigvuldigen met de temperatuur functie.

Diatomeën

$$\frac{\partial \text{DIATOM}}{\partial t} = \frac{(\text{PROD}_D - \text{MORT}_2 - \text{SET}_D) * 1000}{\text{CF}_D} \quad (3.10)$$

waarin:

t	:	tijd	[s]
DIATOM	:	concentratie diatomeën	[$\mu\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$]
PROD _D	:	netto productiesnelheid	[$\mu\text{g} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{l}^{-1}$]
MORT ₂	:	mortaliteit diatomeën	[$\mu\text{g} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{l}^{-1}$]
SET _D	:	bezinkingssnelheid diatomeën	[$\mu\text{g} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{l}^{-1}$]
CF _D	:	conversie factor tussen koolstof en chlorofyl-A voor diatomeën	[-]

De netto productiesnelheid is hetzelfde opgebouwd als bij de overige algen (zie 3.2.1).

Verder worden door het fytoplankton model DYNAMO de hoeveelheid stikstof-, koolstof-, en silicium-detritus berekend. Ook de silicium concentratie zelf wordt berekend. Als laatste berekent DYNAMO de veranderingen van ammonium en nitraat als gevolg van de aanwezigheid van het fytoplankton.

3.3 Processen waterkwaliteitsmodel voor zware metalen

In het zuurstofloze deel van de Schelde komen sulfiden voor van cadmium, koper en zink. Cadmiumsulfide is de meest stabiele verbinding, kopersulfide is minder stabiel, en zinksulfide is de minst stabiele verbinding van de drie. In de aanwezigheid van zuurstof oxyderen de sulfiden. De metalen die vrijkomen bij deze sulfide-oxydatie verdelen zich over de vaste fase en de waterfase volgens de wetten van de thermodynamica (WL, 1991a).

De formulering van de afbraak van de metaalsulfiden in het model is (WL, 1991a):

$$\frac{dM}{dt} = -F \cdot K_s \cdot MS \cdot V \quad (3.11)$$

waarin:

t	:	tijd	[s]
M	:	massa metaalsulfide	[mg]
K_s	:	afbraakcoëfficiënt	[1 · d ⁻¹]
MS	:	conc. metaalsulfide	[mg · l ⁻¹]
V	:	volume	[l]
F	:	functie van zuurstof en temperatuur	
		$0 < F < 1$	[-]

Alle lozingen van cadmium, koper en zink worden door het model als lozingen van metaalsulfide beschouwd. In de aanwezigheid van zuurstof worden deze sulfide verbindingen direct afgebroken. Chroom wordt in het model als het vrije metaal ion Cr^{3+} geloosd. Het belangrijkste chroommineraal in het Schelde-estuarium is $Cr(OH)_3$. De redoxgradiënt in het estuarium is niet direct van invloed op de stabiliteit van dit mineraal. Concentraties van opgelost chroom worden door de pH bepaald (WL, 1991a).

3.4 Processen waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen.

Organische microverontreinigingen adsorberen, vanwege hun in meerdere of mindere mate aanwezige hydrofobe karakter, aan particulier organisch materiaal. Door het vluchtig karakter van de stoffen is ook de uitwisseling met de atmosfeer van belang. Verder zijn organische microverontreinigingen onderhevig aan processen als fotolyse, hydrolyse, en biolyse (WL, 1991a). De gemodelleerde processen zijn de volgende (de Vries, 1987; van Zoest, 1989):

Verdamping

Tijdens het proces van verdamping verdwijnen organische microverontreinigingen uit het systeem. Het proces van verdamping is als volgt gemodelleerd:

$$F = K_1 \cdot C \quad (3.12)$$

$$\frac{1}{K_1} = \frac{1}{K_v} + \frac{RT}{H_e \cdot K_g} \quad (3.13)$$

$$He = He(20) \cdot e^{(K \cdot T)} \quad (3.14)$$

waarin:

F	: flux organische microverontreiniging	[mg · m ⁻² · d ⁻¹]
C	: concentratie opgelost org. microver.	[mg · m ⁻³]
K _i	: 'overall' massa transportcoëfficiënt	[m · d ⁻¹]
K _v	: massatransportcoëfficiënt in vloeibare fase	[m · d ⁻¹]
K _g	: massatransportcoëfficiënt in gasfase	[m · d ⁻¹]
He	: constante van Henry	[Pa · m ³ · mol ⁻¹]
He(20)	: He bij 20°C	[Pa · m ³ · mol ⁻¹]
T	: temperatuur	[°C]
K	: coëfficiënt	[-]

De laatste vergelijking is empirisch vastgesteld door Plasman (1987). De parameters K_v en K_g worden binnen IMPAQT uitgerekend.

Microbiële afbraak

Organische microverontreinigingen kunnen door bacteriën afgebroken worden. Bij de modellering wordt onderscheid gemaakt tussen afbraak van opgeloste organische microverontreinigingen en afbraak van organische microverontreinigingen die aan materiaal geadsorbeerd zijn.

Voor opgeloste organische microverontreinigingen geldt:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K_b \cdot B \cdot S \quad (3.15)$$

Voor geadsorbeerde organische microverontreinigingen geldt:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -K_2 \cdot B^1 \cdot TOC \cdot S \quad (3.16)$$

waarin:

S	: concentratie van voor microbiële afbraak geschikte producten	[mg · m ⁻³]
t	: tijd	[d]
K _b	: tweede orde reactiesnelheid constante	[m ³ · aant.bact. ⁻¹ · d ⁻¹]
B	: concentratie bacteriën	[aant.bact. · m ⁻³]
TOC	: concentratie adsorbens	[gOC · m ⁻³]
B ¹	: concentratie bacteriën op adsorbens	[aant.bact. · gOC ⁻¹]
K ₂	: reactiesnelheid constante	[m ³ · aant.bact. ⁻¹ · d ⁻¹]

Adsorptie

Adsorptie vindt plaats aan particulier organisch materiaal (DOC en POC).

$$\frac{[OMIVE_{part}]}{[OMIVE_{opg}]} = K_{OC} \quad (3.17)$$

$$K_{DOC} = X_{DOC} \cdot K_{OC} \quad (3.18)$$

waarin:

[OMIVE _{part}]:	particulair org. microver. concentratie	[mg · kgOC ⁻¹]
[OMIVE _{opg}]:	opgelost org. microver. concentratie	[mg · l ⁻¹]
K _{OC}	: sediment-water distributie coëfficiënt	[l · kgOC ⁻¹]
K _{DOC}	: coëfficiënt van opgelost organisch koolstof-water distributie	[l · kgOC ⁻¹]
X _{DOC}	: correctie factor adsorptie DOC t.o.v. POC	[-]

De adsorptie aan algen verloopt volgens dezelfde K_{OC} als bij POC.

Diffusie

Diffusie is het verspreiding van een stof door water en bodem. De drijvende kracht hierbij is het concentratieverschil.

$$F = \frac{-p \cdot D \cdot \Delta C}{L} \quad (3.19)$$

waarin:

F	: org. microver. flux	[mg · m ⁻² · d ⁻¹]
p	: porositeit	[-]
D	: diffusie coëfficiënt	[m ² · d ⁻¹]
L	: diffusie lengte water-bodem uitwisseling	[m]
ΔC	: concentratiegradiënt over L	[mg · m ⁻³]

4 De operationalisatie en verbetering van het model.

4.1 Gebruikersvriendelijkheid: verschillende opties menugestuurd

Een aantal handelingen die de gebruiker in de eerste versie van het model met de hand moest uitvoeren zijn geautomatiseerd en in de menu structuur ondergebracht. De onderliggende FORTRAN programma's zijn beschreven door Kater(1993b). Hieronder volgt een kort overzicht van de aanpassingen.

4.1.1 Modelinvoer

- kiezen basisjaar

Het model kan op ieder willekeurig tijdstip worden gestart en iedere willekeurige periode kan worden doorgerekend. Echter zal in de meeste gevallen sprake zijn van het simuleren van één jaar dat start op 1 januari en eindigt op 31 december. Om het opgeven van dit jaar snel te laten verlopen is een speciaal keuze menu gebouwd (programma JAARKEUS). Bij het bouwen van dit menu is gebruik gemaakt van het programmapakket VENUS (WL, 1990c).

- opgeven scenario

Voor het opgeven van een scenario moest een file van meer dan duizend regels worden ge-edit (lozing.inp). Door automatisering van het veranderen van deze file hoeft de gebruiker slechts in een bestand op te geven welke reducties van welke stof hij/zij wenst. Een procedure verzorgt hierna het veranderen van de file (programma's SCENARIO en SCEN-OMI). Bij het bouwen van dit menu is gebruik gemaakt van VENUS.

- draaien scenario

Om gedurende een gekozen periode een scenario te draaien is het programma START aan het model toegevoegd. Dit programma vraagt hoelang een scenario moet duren en zorgt ervoor dat bij de keuze van de modeloptie: "voer scenario uit" het scenario de juiste duur heeft. Ook bij het programma START is gebruik gemaakt van VENUS.

- regel verwijderen

In het oorspronkelijke model moest de gebruiker na het afronden van de invoer nog de bovenste regel uit een invoerbestand verwijderen. Deze actie is geautomatiseerd met het programma VERANDER.

4.1.2 Modeluitvoer

- berekenen belasting op de Noordzee

Het model geeft van ieder modelcompartiment een stofbalans. Tevens wordt een stofbalans van het gehele estuarium gegeven. Uit deze laatste balans kan de vracht op de Noordzee worden berekend. Dit is geautomatiseerd met behulp van het programma RAND.

- aanmaken van files bij de nabewerking

Een van de nabewerkingsprogramma's is het WL-programma JSPOST. Dit programma kan tabellen aanmaken welke weer in te lezen zijn in andere programma's zoals lotus-123 of freelance. Om de tabellen aan te maken moest de gebruiker telkens dezelfde opdracht geven. Deze herhaling kon ondervangen worden door JSPOST commando files aan

te maken. Tevens is de mogelijkheid ingebouwd om de uitvoerfile van Jspost in het model een andere naam te geven, zodat overschrijven door een volgende actie voorkomen kan worden. Het maken en gebruiken van deze commandofiles is met behulp van een aantal procedures geautomatiseerd en in de menustructuur ondergebracht (programma's KOPVRAAG, FILENAAM en SCHRIJF).

- diverse andere nabewerkingsopties

Vanwege de vraag naar andere dan de geleverde nabewerkingsopties is de mogelijkheid gecreëerd zelf diverse soorten files aan te maken.

Deze structuur van de files sluit aan bij de invoer eisen van lotus-123, zodat de files hierin kunnen worden ingelezen. De gebruiker kan dan zelf de gewenste bewerkingen uitvoeren (programma UITVOER).

De diverse opties kunnen gekozen worden in een keuzemenu (template), welke is aangemaakt met behulp van VENUS. De ondergebrachte opties zijn:

- _ Berekenen jaargemiddelde waarde voor de stoffen uit de zware metalen - en zuurstof/stikstof module (programma ZWMET).
- _ Berekenen jaargemiddelde waarde voor de stoffen uit de organische microverontreinigingen module (programma OMIVE).

Deze optie kan in de toekomst verder uitgebreid worden wanneer daar behoefte aan bestaat.

4.2 Calibratieprocedure en de betrouwbaarheid van modelresultaten: het onderbrengen van de modellen in SENECA

Het waterkwaliteitsmodel is ondergebracht in het programmapakket SENECA 1.2 (Simulation Environment for ECological Application, Scholten et al., 1990). Dit programma pakket is in opdracht van de Dienst Getijdewateren ontwikkeld door het Centrum voor marien en estuarien onderzoek van het Nederlands instituut voor oecologisch onderzoek (NIOO/CEMO).

Redenen om te kiezen voor het onderbrengen van de modellen in SENECA-schil waren de volgende (Kater, 1991):

Ten eerste voorziet SENECA in een procedure voor automatische calibratie van een model. Automatische calibratie van de modellen is te verkiezen boven handmatige calibratie, omdat handmatige calibratie veel tijd vraagt en subjectief kan zijn. Met betrekking tot de kwaliteit van de Westerschelde zullen steeds meer en betere gegevens beschikbaar komen. Het inwinnen van deze gegevens gebeurt onder andere in het kader van het project SCHOON. Deze nieuwe gegevens zullen ertoe bijdragen dat het waterkwaliteitsmodel telkens opnieuw gecalibreerd kan worden. Hierbij biedt het automatisch kunnen calibreren van het waterkwaliteitsmodel de bovengenoemde voordelen. Ten tweede biedt SENECA de mogelijkheid de onzekerheid van een model te berekenen. Er is vraag naar fluxberekeningen en modelresultaten. De betrouwbaarheid van deze fluxberekeningen en modelresultaten is afhankelijk van de onzekerheid in de invoer, calibratiegegevens, modelconstructie en modelparameters. Door de modellen in SENECA onder te brengen kan de onzekerheid, veroorzaakt door onzekerheid in de parameterwaarden van de modellen, automatisch en reproduceerbaar bepaald worden.

Het Waterloopkundig Laboratorium heeft het waterkwaliteitsmodel onder SENECA 1.2 gebracht. Hierbij kon worden uitgegaan van de al bestaande DELWAQ SENECA koppeling (WL, 1991b).

De koppeling tussen SENECA en het waterkwaliteitsmodel voor zware metalen, zuurstof en stikstof leverde een product op met de volgende kenmerken:

1. De algemene waterkwaliteitsprocessen en algenprocessen kunnen met een aanvaardbare rekentijd aan automatische calibratie onderworpen worden; voor slibtransportprocessen en zware metalen is dat alleen mogelijk indien lange reketijden aanvaard worden.
2. Op een beperkt aantal toestandsvariabelen (maximaal acht bij een dagelijkse uitvoerfrequentie) kan automatische calibratie plaatsvinden.
3. De applicaties (single-run, automatische calibratie en gevoeligheidsanalyse) kunnen niet vanuit de SENECA schil gedraaid worden. Bovendien moet er een truc uitgehaald worden om na het tijdelijk afbreken van een automatische calibratie of gevoeligheidsanalyse met de tot dan toe berekende resultaten verder te rekenen.
4. De mogelijkheid dat SENECA zelf haar tijdstapgrootte bepaalt kan in verband met de rekentijd het beste door de gebruiker onderdrukt worden zodat de actuele tijdstap steeds gelijk is aan de maximale. De koppeling tussen SENECA 1.2 en het waterkwaliteitsmodel voor organische microverontreinigingen leverde een 'normaal' draaiend model op. De gehele uitvoer van de bovenbeschreven koppelingen is beschreven door het WL (1992).

4.3 De slibbalans

Het model is opgeleverd met de slibbalans beschreven door Van Maldegem (1989). Na studie is een betere slibbalans ontwikkeld. Deze slibbalans is beschreven door Van Maldegem (1993) en Van Maldegem et al. (1993). Deze verbeterde slibbalans is in het model gebracht.

4.4 Procesformuleringen

4.4.1 Denitrificatie in de waterfase

Denitrificatie is het proces waarbij nitraat wordt omgezet in stikstofgas. Dit proces vindt onder (bijna) zuurstofloze omstandigheden plaats, meestal in de waterbodem (Payne, 1973; Seitzinger, 1988). In de bovenloop van de Schelde echter komen, vooral in de zomer, zuurstofloze omstandigheden voor in de waterfase, zodat denitrificatie daar kan optreden. Aan het model is daarom denitrificatie in de waterfase toegevoegd (WL, 1993). De bodemdenitrificatie wordt in het verbeterde model als volgt beschreven:

$$\frac{\delta NO_3^-}{\delta t} = -RC_{BDEN} \cdot [NO_3^-] \cdot f(T) \cdot g(O_2) \quad (4.1)$$

$$f(T) = a^{(T-20)} \quad (4.2)$$

waarin:

NO_3^-	:	nitraatconcentratie in de waterkolom	[mg · l ⁻¹]
RC_{BDEN}	:	denitrificatie snelheid in de bodem	[d ⁻¹]
$f(T)$	:	temperatuurfunctie	[-]
a	:	constante	[-]

T	:	watertemperatuur	[°C]
$g(O_2)$	:	zuurstoffunctie denitrificatie	[-]

De functiewaarde voor de zuurstoffunctie voor denitrificatie in de bodem heeft standaard de waarde 1 gekregen.

De denitrificatie in de waterkolom wordt beschreven door (WL, 1993):

$$\frac{\delta NO_3^-}{\delta t} = -RC_{WDEN} \cdot (NO_3^-) \cdot f(T) \cdot g(O_2) \quad (4.3)$$

waarin:

NO_3^-	:	nitraatconcentratie in de waterkolom	[mg · l ⁻¹]
RC_{WDEN}	:	denitrificatie snelheid	[d ⁻¹]
$f(T)$	:	temperatuurfunctie (zie bodemdenitrificatie)	[-]
$g(O_2)$	:	zuurstoffunctie denitrificatie	[-]

De functiewaarde voor de zuurstoffunctie voor denitrificatie in de waterfase heeft een waarde tussen 0 en 1.

Na het inbouwen van bovengenoemde formuleringen in het model was de conclusie dat het model inderdaad reageert op de verandering in denitrificatie formulering. Het aanbrengen van denitrificatie in de waterfase verbetert het model.

4.4.2 Zuurstoffunctie

De zuurstoffunctie, welke een correctiefactor voor het zuurstofgehalte geeft in de formuleringen voor nitrificatie en de afbraak van

$$g(O_2) = \frac{(O_2 + d)}{(b + d)} \quad (4.4)$$

zuurstofbindende stoffen (BOD en BODN), was in het oorspronkelijke model als volgt geformuleerd:

waarin:

$g(O_2)$	:	zuurstoffunctie	[-]
d	:	constante	[mg · l ⁻¹]
b	:	constante	[mg · l ⁻¹]

De vorm van deze formulering is niet geschikt voor automatische calibratie omdat de parameter d een range van 0 tot ∞ heeft (WL, 1992). Deze parameter is daarom omgezet naar een identieke functie, welke dit probleem niet kent:

$$d = \frac{1.0 * F}{(1 - F)} \quad (4.5)$$

De zuurstoffunctie is niet lineair, daarom is een krommingsfactor in de zuurstoffunctie toegevoegd. De verbeterde zuurstoffunctie wordt nu beschreven als,

$$g(O_2) = (1-F) \cdot \left(\frac{O_2}{b}\right)^G + F \quad (4.6)$$

waarin:

$g(O_2)$	:	zuurstof functie	[-]
F	:	functie waarde in zuurstofloze toestand	[-]
O_2	:	zuurstofconcentratie	[mg · l ⁻¹]
G	:	krommingsfactor voor zuurstoffunctie	[-]

4.5 Handleiding

Na operationalisering van het model bleek de oorspronkelijke handleiding (WL, 1991c) onbruikbaar te zijn. Bij het geoperationaliseerde model is een passende gebruikershandleiding geschreven (Kater, 1993a).

5 Simulaties van periodes uit het verleden.

Met het model kunnen simulaties worden uitgevoerd van de jaren tussen 1980 en 1991. De resultaten van deze simulaties kunnen naast gemeten waterkwaliteitsgegevens gelegd worden. Er kan met belastingen gemanipuleerd worden om zo het effect van de verandering in de belasting na te gaan. Hieronder volgt een voorbeeld van het gebruik van dit soort simulaties.

5.1 Effect verhoogde lozing van één stof op één lokatie

5.1.1 Aanleiding

De simulatie is gedaan naar aanleiding van een vraag van het Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne te Bilthoven naar de effecten van een verhoogde lozing van zuurstofbindende stoffen door een bedrijf in de nabijheid van Terneuzen. Eén van de gestelde vragen luidde: Wat is het effect van een lozing gedurende een jaar (1987) van gemiddeld 153.000 i.e. op de zuurstofhuishouding van de Westerschelde? Zijn deze effecten groter dan het effect van een lozing van gemiddeld 77.800 i.e.?

5.1.2 Methode

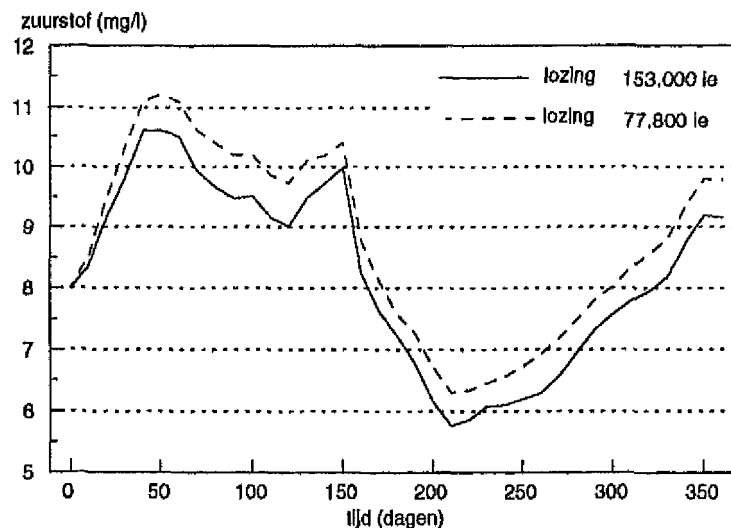
Het model werkt niet met inwoner-equivalenten (i.e.), maar met BOD (= Biological Oxygen Demand: zuurstof wat gebruikt wordt voor de biologische afbraak van koolstofverbindingen). Het gegeven aantal i.e. werd omgerekend naar BOD door de volgende verhouding tussen BOD en i.e.:

$$I. E. = \frac{BOD}{54 \cdot 365} \quad (5.1)$$

Deze verhouding is gekozen omdat bij de vraag werd vermeld dat bij de berekening van het aantal i.e. (inwoners-equivalenten) er vanuit is gegaan dat het aantal i.e. volledig bepaald wordt door het biologisch zuurstofverbruik van het afvalwater. Dit komt tot uitdrukking in het getal 54, wat de hoeveelheid zuurstof die verbruikt wordt weergeeft. De opgegeven belastingen werden omgerekend naar BOD. Het jaar 1987 werd vervolgens gesimuleerd met beide opgegeven belastingen.

5.1.3 Resultaten

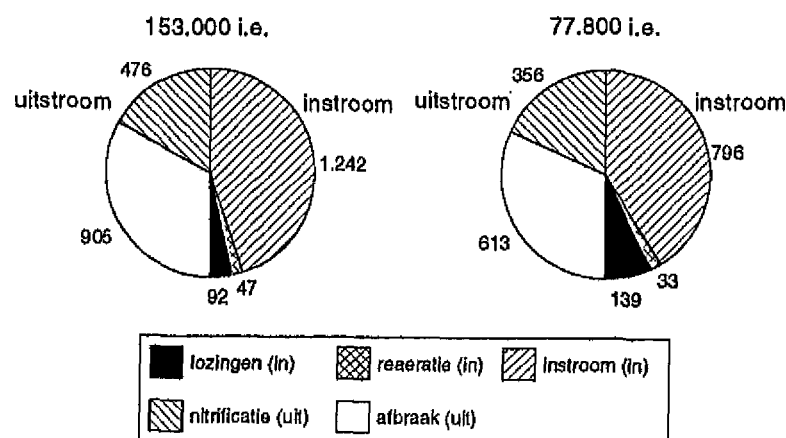
Als eerste werd geconstateerd dat een belasting van 153.000 i.e. 7,3% uitmaakt van de totale belasting met zuurstofbindende stoffen op het Schelde-estuarium tussen Rupelmonde (B) en Vlissingen, terwijl een belasting van 77.800 i.e. 3,7% uitmaakt van de totale belasting (belastinggegevens uit Wattel & Schouwenaar, 1991). De veranderende belasting heeft invloed op de zuurstofconcentratie in modelsegment 13, zoals te zien is in figuur 5.1.



Figuur 5.1 Zuurstofgehalte modelsegment 13.

In absolute zin daalt de zuurstofconcentratie in het modelsegment met gemiddeld 0,5 mg/l als gevolg van een hogere belasting met zuurstofbindende stoffen. In relatieve zin geeft een verhoging van 3,6% (van 3,7% naar 7,3%) van de totale belasting als resultaat een maximale verlaging van de zuurstofconcentratie met 14%. Verwacht kan worden dat het cumulatief effect van meerdere van dit soort relatief kleine verhogingen een groot effect kunnen hebben.

Het model geeft naast concentraties ook informatie over de in- en uitstroom van diverse stoffen in en uit compartimenten (fluxen). In figuur 5.2 is weergegeven wat het aandeel is van de verschillende processen uit de zuurstofhuishouding in de in- en uitstroom van zuurstof in en uit modelcompartiment 13 (Terneuzen) bij de twee verschillende belastingen in inwoners-equivalenten. Met getallen is in de figuur de gemiddelde absolute waarde van de flux (in ton/20d) weergegeven.



figuur 5.2 Zuurstofbalans in modelsegment 13.

De diverse processen in de figuur betekenen het volgende:

-lozingen

De zuurstofvracht die met de lozingen in het compartiment komt.

-reëratie:

De zuurstof die in het systeem komt of uit het systeem verdwijnt door -uitwisseling van zuurstof tussen de atmosfeer en het oppervlaktewater.

-instroom:

De hoeveelheid opgelost zuurstof die compartiment 13 in- of uitstroomt. De instroom kan zowel uit compartiment 12 als 14 plaats vinden, de uitstroom kan ook naar zowel compartiment 12 als 14 plaats vinden.

-nitrificatie:

De hoeveelheid zuurstof die gebruikt wordt voor nitrificatie (de omzetting van ammonium in nitraat).

-afbraak:

De hoeveelheid zuurstof die gebruikt wordt om organische stof af te breken.

De beide belastingen leiden tot andere zuurstoffluxen in modelcompartiment 13. De hoeveelheid zuurstof die verdwijnt door afbraak van zuurstofbindende stoffen is kleiner bij een lagere belasting met zuurstofbindende stoffen, wat te verwachten valt. Het aandeel van afbraak in de zuurstofinstroom blijft echter gelijk. De hoeveelheid zuurstof die verdwijnt door nitrificatie is ook lager bij een lagere belasting, terwijl het aandeel in de uitstroom van zuurstof gelijk blijft. In de uitstroombelastingen verandert dus verhoudingsgewijs niet veel, de hoeveelheden zuurstof die uitstromen zijn echter lager bij een lagere belasting.

Bij een hogere belasting met zuurstofverbruikende stoffen bevat het afvalwater minder zuurstof wanneer het geloosd wordt dan bij een lagere belasting. Dit leidt ertoe dat de aanvoer van zuurstof via lagere belasting hoger is dan bij een hogere belasting. Deze lagere instroom wordt gecompenseerd (balans) doordat er verhoudingsgewijs meer zuurstof uit de omliggende compartimenten instroomt. Het aandeel van zuurstofinstroom via reëratie blijft nagenoeg gelijk.

De netto zuurstofuitwisseling met de Noordzee verandert door de veranderde belasting. Bij een belasting door het bedrijf van 153.000 i.e. treedt er zuurstofimport vanuit de Noordzee op, terwijl bij een belasting van 77.800 i.e. er zuurstofexport naar de Noordzee optreedt. De zuurstofstromen die hier berekend worden zijn in vergelijking met getij gedreven transport niet erg groot. Met elk getij gaat er ongeveer 8000 ton zuurstof het estuarium in en uit.

6 Scenario's

6.1 Draaien van scenario's

Met het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium is het mogelijk om belastingreductie scenario's door te rekenen. In deze scenario's wordt de belasting van diverse stoffen op het estuarium met een bepaald percentage verminderd, waarna de te verwachten verandering in bodem- en waterkwaliteit berekend kan worden. Bij deze reducties kan ieder willekeurig reductiepercentage tussen 0% en 100% aan het model worden opgegeven. De reductie kan plaats vinden op 13 verschillende stoffen, te weten ammonium, nitraat (+ nitriet), organisch stikstof, zuurstofbindende stoffen (BOD), cadmium, koper, zink, chroom, PCB-52, PCB-153, benzo(a)pyreen, fluorantheen en lindaan. In het model zijn 91 lozingslokaties opgegeven. De reducties kunnen per lozingslokatie variëren.

Bij een verandering van de belasting kunnen andere variabelen mee veranderen. Twee van deze meeveranderende variabelen zijn gemodelleerd, en worden bij een reductie van belastingen automatisch aangepast. Deze variabelen zijn de verandering in de zuurstofconcentratie en de verandering in de pH.

Verandering in de zuurstofconcentratie

Het model houdt rekening met het veranderen van de zuurstofconcentratie wanneer er belastingreducties optreden. De zuurstofconcentraties in de Schelde en in al het zijdelings toestromende water worden als volgt berekend:

$$O_2 = \frac{\phi}{100} * O_{2,sat} + (1 - \frac{\phi}{100}) * O_{2,simul} \quad (6.1)$$

waarbij

O_2	:	de zuurstofconcentratie	[mg . l ⁻¹]
$O_{2,sat}$	:	de zuurstofverzadigingsconcentratie	[mg . l ⁻¹]
$O_{2,simul}$	:	de zuurstofconcentratie in het startjaar van het scenario	[mg . l ⁻¹]
ϕ	:	reduktiepercentage	[-]

Verandering in de pH

Het model houdt rekening met de verandering van de zuurtegraad (pH) wanneer er belastingreducties optreden. De pH op de bovenstroomse rand (bij Schelle) is ingesteld op een waarde gelijk aan:

$$pH = \frac{\phi}{100} * pH_{schoon,zoetwater} + (1 - \frac{\phi}{100}) * pH_{simul} \quad (6.2)$$

waarbij

pH	:	de zuurgraad op de rand	[-]
$pH_{schoon,zoet water}$	:	de zuurgraad van schoon, zoet water	[-]
pH_{simul}	:	de pH in het startjaar van het scenario	[-]
ϕ	:	reduktiepercentage	[-]

6.2 Reducties van 0%, 25%, 50%, 75% en 100%

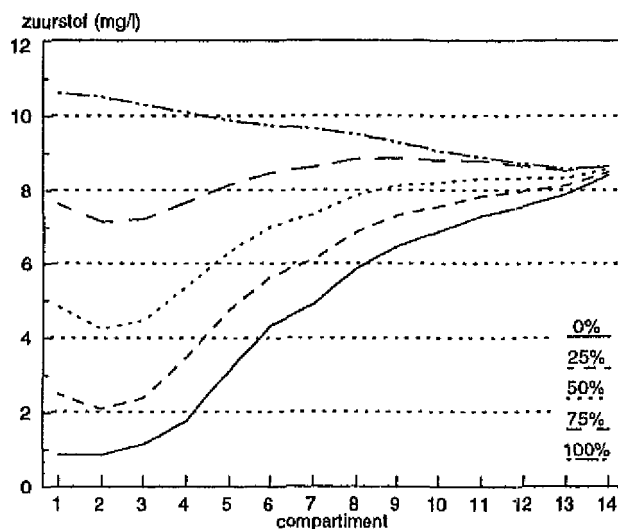
6.2.1 Opzet scenario's

Het effect van een vijftal reducties is doorgerekend met het model. Van de volgende stoffen zijn de belastingen gereduceerd: zuurstofbindende stoffen, ammonium, nitraat, organisch stikstof, cadmium, koper, zink, chroom, PCB-52, PCB-153, benzo(a)pyreen, fluorantheen en lindaan. De reducties waren op alle lokaties even groot. De periode waarover het scenario is berekend is 1984-1994 voor de stoffen die de algemene waterkwaliteit bepalen en de zware metalen. Voor de organische microverontreinigingen, waarvoor geldt dat het bereiken van een evenwicht veel langer duurt, is een periode van honderd jaar doorgerekend: 1984-2084. De volgende vijf scenario's zijn berekend (de scenario's veronderstellen dat de gewenste reducties van de belasting met onmiddellijke ingang worden gerealiseerd):

- 0% reductie: Het uitgangsscenario, waarbij de belasting zich stabiliseert op het niveau van het startjaar. Dit scenario laat zien in hoeverre de concentraties van stoffen in de tijd nog veranderen bij onveranderde belasting.
- 25% reductie: Scenario waarbij alle lozingen van bepaalde stoffen op het estuarium verminderen met 25% in zowel België als Nederland.
- 50% reductie: Scenario waarbij alle lozingen van stoffen op het estuarium verminderen met 50% in zowel België als Nederland.
- 75% reductie: Scenario waarbij alle lozingen van stoffen op het estuarium verminderen met 75% in zowel België als Nederland.
- 100% reductie: Scenario waarbij alle lozingen van stoffen op het estuarium stop worden gezet in zowel België als Nederland.

6.2.2 Resultaten zuurstof en stikstof huishouding

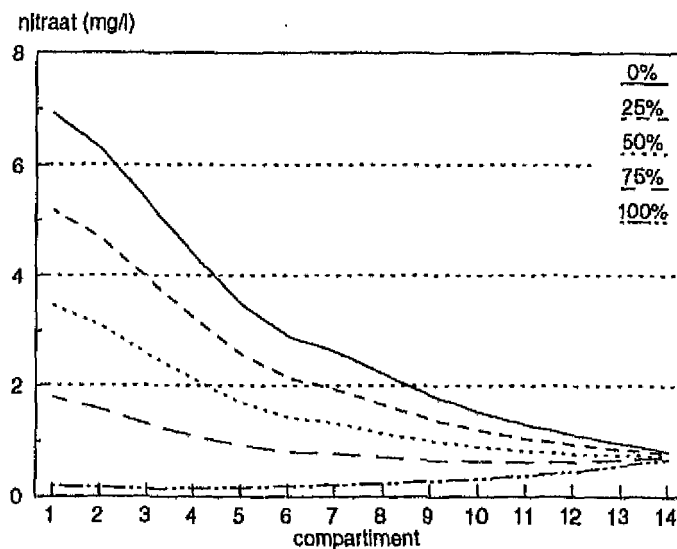
De zuurstofconcentratie in het estuarium neemt bij 100% reductie van de belasting neemt het zuurstof gehalte af als gevolg van de kleinere oplosbaarheid in zoetwater ten opzichte van zoetwater toe naarmate de belasting afneemt, zoals in figuur 6.1 te zien is.



Figuur 6.1 Zuurstof concentratieverloop bij reductie in belastingen.

Bij 100% reductie van de belasting neemt het zuurstofgehalte af als gevolg van de kleinere oplosbaarheid in zoutwater ten opzichte van zoet water. Bij de toenemende reductie wordt de instroom en uitstroom van zuurstof steeds kleiner (van ± 800 ton/20 dagen bij 0% tot ± 50 ton/20 dagen bij 100%). Bij het uitvoeren van toenemende reducties gaat de netto instroom van zuurstof over in een netto uitstroom. De processen reëratie, de afbraak van organische stoffen en nitrificatie blijven verhoudingsgewijs bijna dezelfde rol spelen. Opvallend hierbij is dat bij 100% reductie nog wel sprake is van organische stof afbraak, namelijk die van afgestorven organismen (algen). Bij het 100% reductie scenario is in de zomermaanden het verbruik van zuurstof door organische stof het hoogst. In deze periode begint de afbraak van de algen uit de voorjaarsbloei. De zuurstofbalans wordt bij 100% reductie geheel bepaald door de algendynamiek.

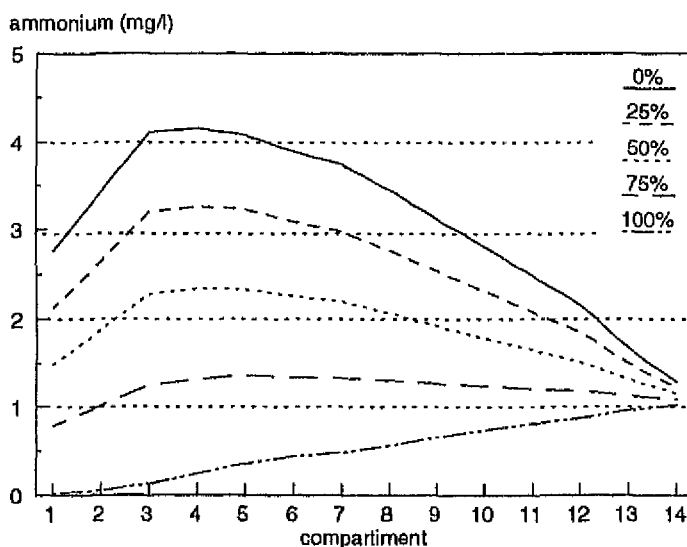
Nitraat wordt deels rechtstreeks geloosd op het estuarium en deels gevormd uit ammonium door de nitrificatie. Nitraat wordt omgezet in stikstofgas door de denitrificatie. Door afnemende nitraatbelasting neemt de concentratie nitraat in het estuarium af, zoals figuur 6.2 laat zien.



Figuur 6.2 Nitraatconcentratie-verloop bij reductie in belasting.

De extra nitraat die gevormd wordt door nitrificatie bij toenemende zuurstofconcentraties is niet terug te vinden in de figuur. Schijnbaar wordt dit verhoogde nitraat aanbod direct (in de bodem) gedenitrificeerd.

Ammonium wordt rechtstreeks geloosd op het estuarium en het ontstaat wanneer organisch stikstof wordt afgebroken (ammonificatie). Ammonium verdwijnt door nitrificatie, het proces waarbij ammonium wordt omgezet in nitraat. De nitrificatie reactie verbruikt zuurstof. Gaande van 0% naar 100% reductie daalt de ammoniumconcentratie in het estuarium (figuur 6.3). Dit is rechtstreeks het gevolg van de verminderde ammoniumbelasting. Daarnaast vermindert ook de organische stikstofbelasting, waardoor er minder ammonium gevormd wordt.

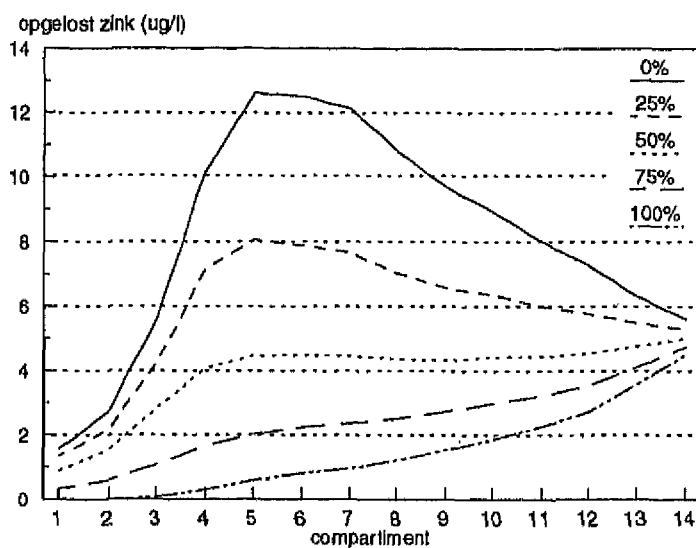


Figuur 6.3 Ammoniumconcentratie-verloop bij reductie in belastingen.

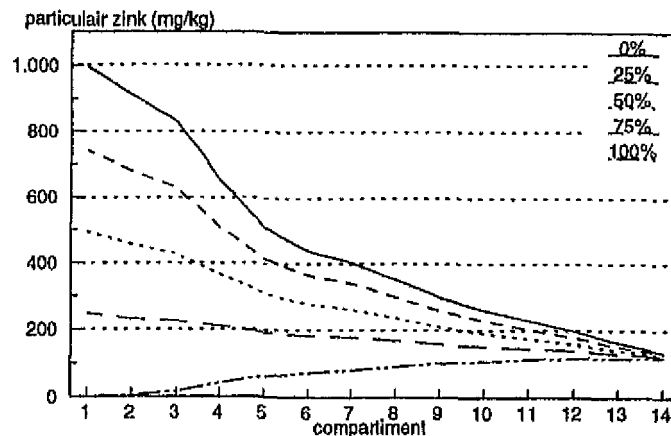
In de eerste compartimenten is de zuurstofconcentratie bij lagere reductiepercentages laag. Hierdoor wordt er weinig ammonium genitrificeerd, zodat de ammonium concentratie in eerste instantie in zeewaartse richting toeneemt door de zijdelingse belasting. De zuurstofconcentratie loopt in de volgende compartimenten echter op, zodat er meer genitrificeerd wordt en de ammoniumconcentratie af gaat nemen.

6.2.3 Resultaten zware metalen.

Zowel de opgelost zink concentraties (figuur 6.4) als particulier zink gehalten (figuur 6.5) dalen met toenemende belastingreductie.



Figuur 6.4 Verloop in opgelost zink concentratie bij reductie in belastingen.

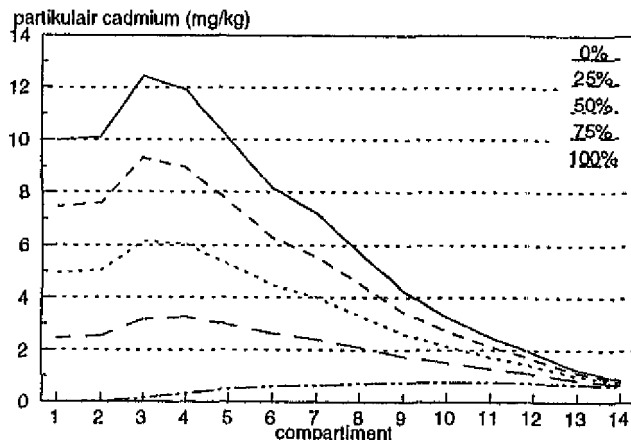


Figuur 6.5 Verloop in particulier zink gehalte bij reductie in belastingen.

In de eerste compartimenten is bij lage belastingsreductie nauwelijks zuurstof aanwezig. De zinksulfiden worden hier niet afgebroken, de concentratie opgelost zink blijft daardoor laag. Met toenemende zuurstofconcentratie neemt de afbraak van zinksulfide toe, en ontstaat er opgelost zink: deze concentratie gaat stijgen. In de aan zee liggende compartimenten treedt menging op met relatief schoon zeewater. Ongeveer vanaf compartiment 7 zorgt deze menging bij de lagere reducties ervoor dat de opgeloste zinkconcentratie weer daalt. De hogere reducties zorgen voor een lagere belasting met zink, zodat zowel de particuliere als opgeloste zinkconcentratie laag blijft. Doordat er vanaf compartiment 1 bij hogere reducties ook al voldoende zuurstof aanwezig is ontstaat geen plek in de opgeloste zinkconcentraties zoals bij lage reductiepercentages het geval is.

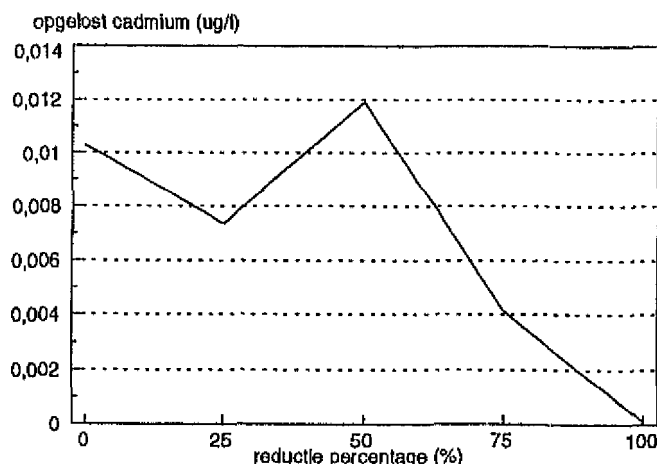
Bij het beschouwen van de balans voor zink blijkt dat bij toenemende reductie de instroom en uitstroom van zink kleiner wordt (van ± 200 kg/20 dagen bij 0% tot ± 8 kg/20 dagen bij 100%). Naarmate er meer reductie wordt uitgevoerd wordt de zinkimport via het particulier zinksulfide verhoudingsgewijs kleiner. De zinksulfide-verbindingen worden alleen geoxydeerd in de aanwezigheid van zuurstof, waardoor zink mobiliseert. Dit gemobiliseerde zink kan zich bijvoorbeeld aan zwevend slib binden. Door de verbeterde zuurstofconcentraties in de omgeving van modelcompartiment 5 (grens België-Nederland) valt inderdaad te verwachten dat zinksulfide-verbindingen eerder geoxydeerd worden, en de import van zinksulfide daalt. In de wintermaanden erodeert er slib met daaraan gebonden particulier zink vanuit de bodem. In de zomer wordt zink juist naar de bodem geëxporteerd. Dit wordt veroorzaakt door het seizoensgedrag van slib zoals die in de input van het model bepaald is. De variatie in seizoenen is bij alle scenario's te vinden, maar bij de kleinste reducties wordt dit gedrag overheerst door de andere processen die de zinkbalans bepalen. Bij 0% reductie overheerst het proces van oxydatie van zinksulfide. Het belang van dit proces neemt relatief af wanneer er belastingreductie optreedt. Bij 100% reductie wordt de zinkbalans grotendeels bepaald door de slibdynamiek. De slibdynamiek is in de invoer van het model gedefinieerd.

De particulier cadmium concentratie neemt af met afnemende cadmiumbelasting (figuur 6.6).



Figuur 6.6 Verloop in particulier cadmiumgehalte bij reductie in belasting.

Bij de lagere reducties is eerst nog een toename van de particulier cadmiumconcentratie te zien. Deze wordt veroorzaakt door een piekbelasting op modelcompartiment drie (17% van de totale cadmiumbelasting op het estuarium, exclusief de belasting op de rand bij Rupelmonde (Wattel & Schouwenaar, 1991)). Niets van deze belasting wordt afgebroken, omdat er nauwelijks zuurstof aanwezig is. Het opgeloste cadmium laat globaal een zelfde beeld zien als opgelost zink. Zie voor de verklaring aldaar. Verschillen zijn er echter wel te vinden in de eerste modelcompartimenten. Figuur 6.7 laat de opgelost cadmium concentratie zien in modelcompartiment 3 (Antwerpen) bij de vijf berekende reductie-scenario's.



Figuur 6.7 Opgelost cadmium concentratie-verloop bij reductie in belasting.

Bij toenemende reductie neemt de opgelost cadmium concentratie eerst af, dan weer toe, en vervolgens weer af. Dit wordt veroorzaakt door twee processen die elkaar tegenwerken. Aan de ene kant is er het proces van vermindering van belasting, waardoor er steeds minder cadmium in het water wordt geloosd, wat leidt tot lagere cadmium concentraties in het water. Aan de andere kant is er het proces van afbraak van cadmiumsulfide verbindingen.

Door de verminderde belasting neemt de zuurstofconcentratie in het water toe, waardoor de sulfide verbindingen afgebroken gaan worden, wat leidt tot een hogere cadmium concentratie in het water. In de range van 0%-25% reductie overheerst het eerste proces (minder lozingen): de cadmium concentratie daalt. In de range 25%-50% komt er door de reductie echter zoveel zuurstof in het water dat de afbraak van cadmiumsulfide verbindingen meer cadmium leveren dan de reducties verminderen: de cadmiumconcentratie neemt weer toe. Echter, wanneer de reductie hoger wordt dan 50% neemt het proces van vermindering van belasting weer de overhand en daalt de cadmium concentratie van het water weer.

De opgeloste en particuliere koper concentratie geeft, bij een ander concentratieniveau, eenzelfde verloop te zien als opgelost en particulier zink (figuren 6.4 en 6.5). Zie voor verklaring aldaar.

7 Beperkingen van het model

Bij het draaien en interpreteren van scenario's dient rekening gehouden te worden met de beperkingen van het model. Verschillende factoren zijn niet in de procesformuleringen van het model opgenomen, maar zouden wel de uitkomsten van de scenario's kunnen beïnvloeden.

Voorbeelden van deze factoren zijn:

- de partiticoëfficiënt verandert niet mee bij sanering
- de alkaliteit verandert niet mee bij sanering
- het slibtransport is voor verbetering vatbaar
- de verhouding ammonium/nitraat in de belasting blijft bij sanering gelijk
- de invloed van de waterbodem op de O_2 en N huishouding is niet gemodelleerd

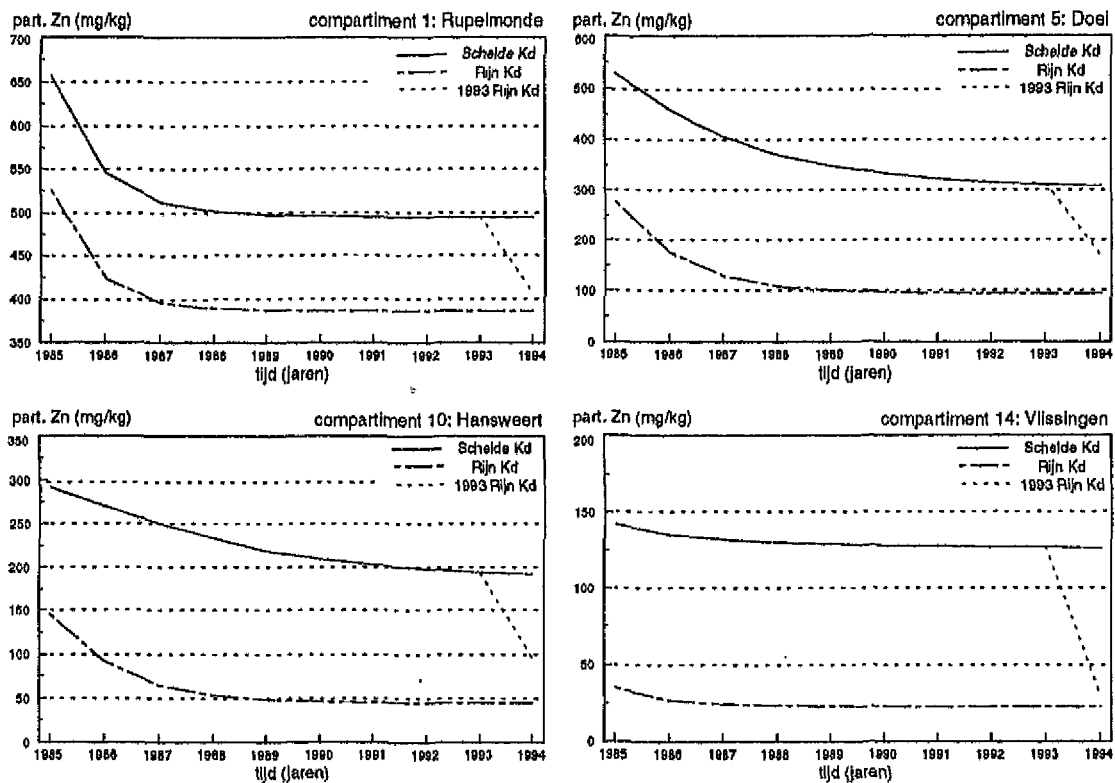
Ter illustratie worden bovengenoemde factoren in de volgende paragrafen toegelicht.

7.1 Partiticoëfficiënt

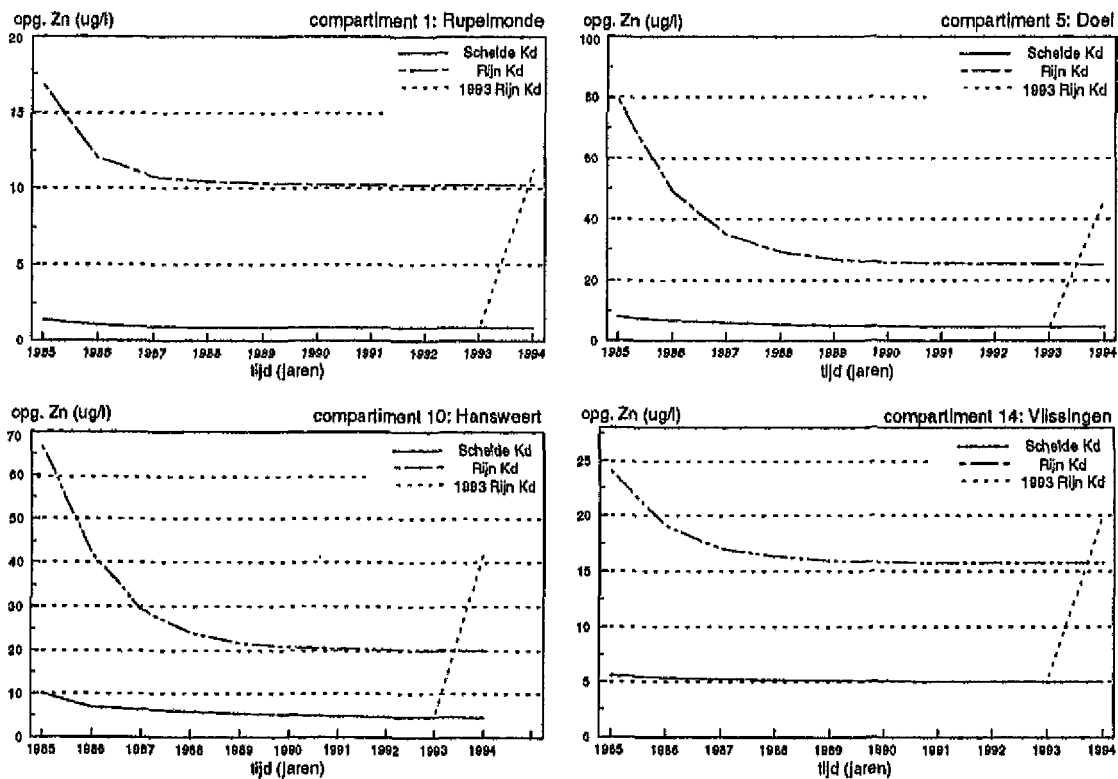
Bij de scenario's blijft de partiticoëfficiënt (K_d : de verhouding tussen de hoeveelheid particulier gebonden metaal en de hoeveelheid opgelost metaal) constant. De K_d in het huidige model is hoog. Andere oxische estuaria geven een lagere K_d te zien. Door sanering kan de K_d lager worden, doordat de adsorptiecapaciteit van zware metalen aan slib door de totale belastingreductie verandert. Dit betekent dat in de toekomst de concentratie opgeloste metalen relatief hoger kan worden dan dat het model berekent.

Dat de partiticoëfficiënt invloed heeft op de resultaten van scenario's is aangetoond met de volgende simulatie. Bij deze simulatie is gekeken naar de metalen cadmium en zink. Een scenario van 50% reductie van alle belastingen is gedraaid met de K_d 's van cadmium en zink zoals die voor de Schelde in het model is ondergebracht. Ook is eenzelfde scenario gedraaid, maar nu met de K_d 's van cadmium en zink van de Rijn. Verondersteld kan worden dat de K_d 's van cadmium en zink van de Schelde die van de Rijn benaderen zal wanneer de Schelde wordt gesaneerd. Tenslotte is een scenario gedraaid waarin met de Schelde K_d is begonnen, maar na 9 jaar is overgegaan op de K_d van de Rijn.

Figuur 7.1 laat het verloop van de particulier zink gehalten zien gedurende de tien simulatie jaren. Het verloop van cadmium laat hetzelfde beeld zien. Als eerste kan geconcludeerd worden dat verschillende K_d 's ook verschillende concentraties tot gevolg hebben. Ten tweede laten de figuren laten zien dat naarmate de zee wordt genaderd het verschil in concentraties tussen de Rijn- K_d en de Schelde- K_d toeneemt. Ten derde kan geconcludeerd worden dat het verloop van de concentraties voor de verschillende K_d 's gelijk is. De laatste conclusie is dat de Rijn- K_d in het laatste simulatiejaar leidt tot een snelle daling van de concentraties ten opzichte van de Schelde- K_d , maar de concentratie van de simulatie met volledige Rijn- K_d wordt niet gehaald.



Figuur 7.1 Verloop in particulair zink gehalten bij verschillende K_d .



Figuur 7.2 Verloop in opgeloste zink concentratie bij verschillende K_d .

Figuur 7.2 laat het verloop van de opgeloste zinkconcentratie zien gedurende de tien simulatie jaren. Ook hier geldt dat het verloop van cadmium hetzelfde beeld laat zien. Ook nu kan geconcludeerd worden dat er een verschil is. De figuren laten verder zien dat naarmate de zee wordt genaderd het verschil tussen de Rijn- K_d en de Schelde- K_d eerst toeneemt (van compartiment één naar compartiment vijf), om vervolgens weer af te nemen (van compartiment tien naar compartiment 14). Ten derde valt op dat het verloop van de concentraties verschilt tussen het scenario met de Schelde- K_d en het scenario met de Rijn- K_d . Het scenario met de Schelde- K_d laat een veel mindere daling in concentratie in zeewaartste richting zien dan het scenario met de Rijn- K_d . De vierde conclusie is dat een Rijn- K_d in het laatste simulatiejaar leidt tot een snelle stijging van de concentraties, die de concentratie van de Rijn- K_d echter nog niet haalt.

7.2 Alkaliteit

Door sanering kan de alkaliteit van het water veranderen. In het huidige model worden eventuele veranderingen in de alkaliteit niet in beschouwing genomen. Te verwachten valt dat de alkaliteit daalt als gevolg van belastingreductie. Bij vermindering van de alkaliteit komen er minder carbonaat/bicarbonaat complexen, waardoor er relatief lagere opgelost zink en opgelost koper concentraties voor zullen komen.

7.3 Slibtransport

De verspreiding van zware metalen is sterk afhankelijk van slibtransport. De huidige slibbalans is voor verbetering vatbaar. De huidige tendens is dat slibgehalten in het estuarium dalen, wat invloed heeft op de speciatie van metalen, maar ook op algen. Ook zal de slibbalans veranderen omdat er minder antropogeen, en dus minder slib dat rijk is aan organisch materiaal, in het estuarium komt. De invloed van dit laatste op de K_d (zie b.) lijkt beperkt.

7.4 Ammonium-nitraat verhouding

Door de bouw van rioolwaterzuiveringsinstallaties zal de verhouding tussen ammonium en nitraat in de resterende belasting veranderen. In de opgelegde scenario's blijft de verhouding tussen ammonium en nitraat in de belasting gelijk, dit is echter niet reëel.

7.5 Waterbodem

De invloed van de waterbodem op de zuurstof-, stikstof en fosforhuishouding is niet gemodelleerd. In de huidige situatie wordt de invloed van de bodem zeer klein geacht. Deze invloed kan bij belastingreducties een grotere rol gaan spelen. Door belastingreductie zal het zuurstofverbruik van de bodem een relatief groter deel van de totale zuurstofflux gaan uitmaken. De Westerschelde bodem is een zandige bodem. Wanneer de zuurstofflux naar de bodem een belangrijke rol gaat spelen wordt de zuurstofconcentratie in de waterkolom door het model dus te hoog berekend.

8 Automatische calibratie

8.1 Inleiding

Met het onderbrengen van het model in SENECA is het relatief eenvoudig geworden het model te calibreren. Dit is gedaan voor het algemene waterkwaliteitssysteem (zuurstof- en stikstofhuishouding). De waterkwaliteitsdata waarop is gecalibreerd zijn dezelfde als de data waarop de initiële handmatige calibratie is uitgevoerd. Hierdoor is het mogelijk de resultaten van beide calibraties te vergelijken.

Er zijn 13 parameters van het algemene waterkwaliteitssysteem gecalibreerd. De toestandsvariabelen waarop is gecalibreerd zijn: zuurstof, ammonium, nitraat en de afbraak van organisch koolstof (BOD). Tabel 8.1 geeft een overzicht van de gekozen parameters, de processen waaruit zij komen en de opgegeven range van de parameters. De gekozen ranges zijn afkomstig uit WL (1992) en WL (1993). Als invoer zijn de lozingen van 1987 gebruikt. Voor calibratie zijn 715 runs uitgevoerd.

TABEL 8.1

Te calibreren parameters met hun range.

parameter	(proces)	range		
K_l	(reëratie)	0,5	-	2,0
RC_{NIT}	(nitrificatie)	0,05	-	0,4
a_{nit}	(nitrificatie)	1,03	-	1,11
F_{NIT}	(nitrificatie)	0	-	
G_{NIT}	(nitrificatie)	-1	-	0
RC_{DENIT}	(denitrificatie)	0,04	-	0,15
RC_{BOD}	(BOD-afbraak)	0,05	-	0,2
a_{bod}	(BOD-afbraak)	1,0	-	1,2
F_{BOD}	(BOD-afbraak)	0	-	1
G_{BOD}	(BOD-afbraak)	-1	-	0
RC_{BODN}	(BODN-afbraak)	0,02	-	0,1
a_{bodn}	(BODN-afbraak)	1,0	-	1,2
d_{BODN}	(BODN-afbraak)	2,5	-	3,5

8.2 Beste fit

Tabel 8.2 geeft een overzicht van de parameterwaarden van de hier uitgevoerde automatische calibratie ("best"). Om te vergelijken worden ook de parameterwaarden van de automatische calibratie op 7 parameters gegeven ("T941"). Deze calibratie is uitgevoerd door het Waterloopkundig Laboratorium (WL, 1992). Ook zijn de parameterwaarden van de handmatige calibratie van de eerste versie van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium gegeven ("SAWES"). Deze handmatige calibratie is uitgevoerd door het Waterloopkundig Laboratorium (WL, 1991a).

Tabel 8.2

De parameters met hun waarde afkomstig uit de run met de fit ("best"), de calibratie door het Waterloopkundig Laboratorium ("T941", uit: WL, 1992) en de parameterwaarden in het opgeleverde water-kwaliteitsmodel Schelde-estuarium ("SAWES", uit: WL, 1991a.)

parameter	"best" (automatisch, 13 parameters)	"T941" (automatisch, 7 parameters)	"SAWES" (handmatig, 11 parameters)
K_1	0.745	1.068	1.0
RC_{nit}	0.112	0.260	0.25
A_{nit}	1.068	-	1.1
F_{nit}	0.452	0.208	0.231
G_{nit}	-0.508	-	-
RC_{denit}	0.087	0.100	0.07
RC_{bod}	0.176	0.172	0.1
a_{bod}	1.159	-	1.07
F_{bod}	0.029	0.893	0.5
G_{bod}	-0.215	-	-
RC_{bodn}	0.039	0.064	0.05
a_{bodn}	1.086	-	1.07
d_{bodn}	2.704	-	3.0

Tussen de automatische calibratie die hier is uitgevoerd en de automatische calibratie uitgevoerd door het WL bestaan in de invoer twee verschillen:

1. Bij de calibratie door het WL zijn 7 parameters gecalibreerd, in deze calibratie zijn 13 parameters gecalibreerd.
2. De calibratie van het WL is uitgevoerd met gemiddelde lozingen van de periode 1980-1988, de nieuwe calibratie met lozingen van 1987. Deze verschillen hebben tot gevolg dat de parameterwaarden in drie van de zeven gevallen behoorlijk (meer dan 30%) van elkaar verschillen. De parameterwaarden van de handmatige calibratie liggen afwisselend dichter bij de WL-calibratie en de hier beschreven calibratie.

Bij het project waarin waterkwaliteitsmodel en SENECA werden gekoppeld is tevens voor de processen van nitrificatie en afbraak van organisch koolstof (BOD) een nieuwe formulering van de zuurstoffunctie ingevoerd. De oude zuurstoffunctie is beschreven in formule 2.12, terwijl de nieuwe zuurstoffunctie is beschreven in de formules 2.5 en 2.9. Het effect hiervan is terug te vinden wanneer de hier beschreven calibratie (met nieuwe formulering) en de handmatige calibratie (met oude formulering) worden vergeleken. Het verschil tussen de functiewaarden in zuurstofloze toestand (F) bedraagt bij de nitrificatie ongeveer 50%, en bij de BOD-afbraak meer dan 90%. Hierdoor veranderen ook de parameterwaarden voor de afbraaksnelheden (RC_{BOD} en RC_{NIT}).

Bijna hetzelfde blijft de waarde van de constante uit de temperatuurfunctie(a), namelijk 8% verschil bij de BOD-afbraak en 1% verschil bij de nitrificatie. Dat dit verschil niet groot is, is niet verwonderlijk, omdat dit niet wordt beïnvloed door de zuurstoffunctie (formule 3.4).

Voor de processen van reëratie, denitrificatie en afbraak van organisch stikstof liggen de parameterwaarden van de hier uitgevoerde calibratie allemaal binnen een range van 30% van de parameterwaarden van de handmatige calibratie. In deze processen zijn geen veranderingen ingevoerd.

9 Toekomst perspectief

9.1 Calibratie op recente meetgegevens

Het model is momenteel handmatig gecalibreerd op meetgegevens uit 1987. Met het onderbrengen van het model onder SENECA is het relatief eenvoudig geworden het model opnieuw te calibreren. Het is nu mogelijk, indien dit gewenst is, het model op meer recente meetgegevens te calibreren.

9.2 Onzekerheidsanalyses

In de toekomst moet de onzekerheid van het model bepaald gaan worden. De onzekerheid van het model wordt onder meer bepaald door de onzekerheid in de parameterwaarden en de onzekerheid in de ingevoerde belastingen.

De onzekerheid in de parameterwaarden kan uitgewerkt worden met behulp van SENECA. Binnen SENECA is het mogelijk simulaties te laten uitvoeren met telkens een andere parametersetting. De ruimte die de parameters krijgen en welke parameters "losgelaten" worden is van te voren ingesteld. Uit de resultaten van onzekerheidsanalyse wordt het betrouwbaarheidsinterval rondom de mediaan geschat.

De onzekerheid in de belastingen kan uitgewerkt worden door het model te voeden met diverse belastingen: de minimaal mogelijke belasting, de mediane belasting (welke standaard gebruikt wordt), en de maximale belasting. Uit de gegevens van de simulaties kan het betrouwbaarheidsinterval rondom de mediaan worden geschat.

9.3 Beleidsscenario's

Met het model worden beleidsscenario's uitgevoerd. Deze scenario's hebben betrekking op de reductie van belastingen op het estuarium, en op de sanering van de bodem van het estuarium. Er is uitgegaan van de reducties in de belastingen zoals vastgesteld in het MINAplan voor België en het beleidsplan Westerschelde voor Nederland (daarom noemen we het beleids-Scenario's). De belasting reducties worden weergegeven in tabel 9.1. In beide plannen wordt gewerkt met de periode 1985-1995. Gekozen is de periode 1985-2010 te berekenen, waarbij in ieder geval in 1995 uitvoer gegenereerd zal worden. De volgende scenario's zijn voorgesteld:

- Het 0-scenario: in België en Nederland wordt geen reductie van emissies uitgevoerd. Dit scenario geeft antwoord op de vraag wat de situatie van de water en bodemkwaliteit is wanneer er geen belastingreductie wordt uitgevoerd.
- In België worden de reducties van het MINAplan uitgevoerd, in Nederland de reducties van het beleidsplan Westerschelde. Wat is het effect op de bodem- en de waterkwaliteit?
- Voor stikstofverbindingen en zuurstofbindende stoffen wordt een reductie uitgevoerd zoals in het MINAplan en het beleidsplan Westerschelde is omschreven. Nagegaan wordt wat het effect van deze reducties is op de zware metalen in het water en in de bodem, en op de zuurstofhuishouding in het estuarium. Daarnaast wordt een

- volledige reductie van stikstofbelasting en belasting met zuurstofbindende stoffen uitgevoerd, in zowel België als Nederland. Ook hier is de vraag wat het effect is van deze reducties op de zware metalen in het water en in de bodem en op de zuurstofhuishouding.
- In de bodem van de Zeeschelde wordt 1.3 miljoen ton slib gesaneerd. De emissies blijven gelijk. Wat is het effect van de sanering op de bodem- en waterkwaliteit in het estuarium?
 - De bodem in het gehele estuarium wordt gesaneerd, en de emissies worden gereduceerd conform het MINAplan en het beleidsplan Westerschelde. Wat is het effect op de bodem- en waterkwaliteit in het estuarium.

Tabel 9.1
de belasting reducties zoals
vastgesteld in het MINAplan en
het beleidsplan Westerschelde

	plan	beleidsplan Westerschelde
NH ₄ ⁺	50%	50%
NO ₃ ⁻	50%	50%
org. N	50%	50%
O ₂ -bindende stoffen	50%	70%
Cd	50%	80%
Cu	50%	50%
Zn	50%	50%
Cr	50%	50%
PCB-153	?	80%
PCB-52	?	80%
B(a)P	?	80%
Fla	?	80%
lindaan	50%	80%

Door Gabriëls (1993) is nagegaan welke waarde op de vraagtekens in tabel 9.1 bij het MINA plan moesten worden ingevuld. Het onderzoek wees uit dat de gemodelleerde polychloorbifenylen en polyaromatische koolwaterstoffen alle met 100% gereduceerd moeten worden om aan de in het MINA plan gestelde eisen te voldoen.

9.4 Watersysteemverkenningen

De Watersysteemverkenningen vormen de wetenschappelijke basis van de in 1996 uit te brengen Vierde Nota voor de Waterhuishouding. In 1994 en 1995 zullen er beleidsanalyses worden uitgevoerd. Onderdeel van deze analyses vormt het uitvoeren van verkenningen naar de verwachte toestand van de watersystemen bij diverse scenario varianten en beleidsopties (Tappel & WalTMans, 1993).

Bij het uitvoeren van de verkenningen zal voor het Schelde-estuarium onder meer het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium worden ingezet.

10 Conclusie

Het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium is operationeel. Het model kan gebruikt worden voor beleidsvoorbereiding en -advisering.

Het model berekent de waterkwaliteit uit opgegeven belastingen voor stoffen uit de zuurstofcyclus (zuurstof, zuurstofvraag door afbraak van organische stoffen), stoffen uit de stikstofcyclus (organisch stikstof, ammonium, nitraat), voor fytoplankton (diatomeeën en overige algen), voor zware metalen (cadmium, koper, zink en chroom) en voor organische microverontreinigingen (PCB-52, PCB-153, fluorantheen, benzo(a)pyreen en lindaan).

Om met het model te kunnen werken moet de gebruiker meerdere malen achter een personal computer hebben gezeten. Uitgebreide kennis met betrekking tot het werken van diverse programma's is niet noodzakelijk, maar kan wel handig zijn. Voor de gebruiker is een gebruikershandleiding beschikbaar.

Het gehele model is menugestuurd. Een gevorderde gebruiker kan de diverse programma's ook direct onder MS-DOS draaien, hoewel dit weinig voordelen biedt.

Voor het uitvoeren van calibraties en onzekerheidsanalyses is het model aan het programmapakket SENECA is gekoppeld, wat de gewenste faciliteiten biedt.

Hoewel het model nu goed bruikbaar is voor beleidsvoorbereiding en -advisering blijft het mogelijk verbeteringen en uitbreidingen aan het model uit te voeren.

11 Literatuur

Gabriëlse, G.A. 1993

Lozingenreductie en haalbaarheid Vlaamse basiskwaliteit. Stageverslag werkdokument GWWS-93.877x. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg / Hogeschool Zeeland, Aquatische Ecotechnologie, Vlissingen.

Gils van, J.A.G, Ouboter, M.R.L. & Rooij de, N.M. 1993

Modelling of water and sediment quality in the Scheldt estuary. *Neth. J. of Aq. Ecol.* 27(2-4): 257-265.

Holland A., Bitter, G., van Eck, B., van de Kamer, S., Lefèvre, F., Schouwenaar, A. & Wulffraat, K. (1991)

De belasting van het Schelde-estuarium (1980-1988). Nota GWWS-91.082, SAWES-nota 91.07. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Kater, B.J. 1991

Projectschets OPERAWES. Notitie GWWS-91.13055. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Kater, B.J. 1993a

Handleiding waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium versie 2.1. Werkdocument GWWS-93.835x. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Kater, B.J. 1993b

De programma's die hebben bijgedragen aan de operationalisatie van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium. Werkdocument GWWS-93.837x. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Lefèvre, F.O.B. 1994

Ontwikkelingen in de belasting en de waterkwaliteit van het Schelde-estuarium in de periode 1980-1991. Rapport DGW-92.042. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Maldegem van, D.C. 1989

Schatting natuurlijk slibtransport op de Belgisch-Nederlandse grens van het Schelde-estuarium. Notitie GWAO-89.1255. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Maldegem van, D.C. 1993

De slibbalans van het Schelde-estuarium. Nota GWAO-91.081, SAWES-nota 91.08. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren/Rijksinstituut voor Kust en Zee, Middelburg.

Maldegem van, D.C., Mulder, H.P.J. & Langerak, A. 1993

A cohesive sediment balance for the Scheldt estuary. *Neth. J. of Aq. Ecol.* 27(2-4): 247-256.

Payne, W.J. 1973

Reduction on nitrogenous oxides bij microorganisms. *Bacterial Rev.* 37: 409-452.

Plasman, H.H. 1987

Bepalen van de temperatuursafhankelijkheid van de constante van Henry van chloorbenzenen en de interacties van deze stoffen met opgelost humuszuren. DBW/RIZA notitie 87-042X. Rijkswaterstaat, DBW/RIZA, Lelystad.

Scholten, H, de Hoop, B.J. & Herman P.M.J. 1990

SENECA 1.2. A simulation environment for ecological application. Manual. Delta Institute for Hydrobiological Research. Yerseke.

Schouwenaar, A. 1993

Cijfers achter de belasting van het Schelde-estuarium over de periode 1980-1991. Werkdocument GWWS-93.817x. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Schouwenaar, A. & Kater, B.J. 1993

De uitbreiding van de database van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium 2.1. Werkdocument GWWS-93.836x. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

Seitzinger, S.P. 1988

Denitrification in freshwater and coastal marine ecosystems: Ecological and geochemical significance. *Limnol. Oceanogr.* 33: 702-724.

Tappel, H. & Waltmans, M.J.P.H. 1993

Ruimtelijke verkenningen in watersysteemverkenningen. Document ANA93.54. ICIM/DGW, Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Den Haag.

Vries de, D.J. 1987

IMPAQT, a mathematical model for simulation of the fate of micro-pollutants in aquatic systems. Model description. Rapport TOW-IW T 250. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

Wattel, G. & Schouwenaar, A. 1991

De bestanden met hieruit de berekende belasting van het Schelde-estuarium over de periode 1980 - 1988. SAWES-nota 91.06. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.

WL 1988

DELWAQ users manual, version 3.0, final draft. Delft Hydraulics.

WL 1989

Modellering van nutriënten kringlopen in de Noordzee: EQUIPMONS en DYNAMO. Rapport T0234.01/T0500.03. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

WL 1990a

Manual CHARON, JSBACH, FUN. Delft Hydraulics.

WL 1990b

IMPAQT, A mathematical model for simulation of the fate of micropollutants in aquatic systems. Users Manual, version 3.0. Delft Hydraulics.

WL 1990c

PC-software: VENUS/PLUTO. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

WL 1991a

Waterkwaliteitsmodel Westerschelde. concept-Rapport T 257, concept-SAWES-nota 91.01. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

WL 1991b

Koppeling DELWAQ-SENECA, WL-ecologische modellen onder SENECA. Rapport T830. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

WL 1991c

Waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium. Gebruikershandleiding. Rapport T257, SAWES-nota 91.02. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

WL 1992

Operationalisatie van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium. Koppelingen SENECA-DELWAQ-CHARON & SENECA-IMPAQT. Rapport T 941. OPERAWES-nota 1a. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

WL 1993

Operationalisering van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium. Uitbreiding procesformuleringen met denitrificatie waterkolom. Rapport T1089. Waterloopkundig Laboratorium, Delft.

Zoest van, R. 1989

De modellering van geselecteerde organische microverontreinigingen in het Schelde estuarium: haalbaarheidsstudie. In: Gehalten, gedrag en modellering van organische microverontreinigingen in het Schelde estuarium, R. van Zoest, Nota GWAO-89.023, SAWES-nota 90.01. Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg.