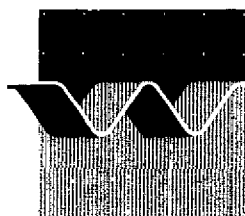


Evaluatie modellering organische microverontreinigingen Schelde-estuarium

verbeterde toepassing van SAWES-IMPAQT

M.R.L. Ouboter, G.T.M. van Eck



waterloopkundig laboratorium | WL

Inhoud

1	Inleiding en samenvatting.	1 — 1
2	Beschrijving van het verbeterde SAWES-IMPAQT model.	2 — 1
2.1	Processen	2 — 1
2.2	Procesformuleringen	2 — 2
2.2.1	Algemeen	2 — 2
2.2.2	Het transport van de geadsorbeerde fractie	2 — 2
2.2.3	Organisch koolstof balans	2 — 3
2.3	Procesparameters	2 — 5
2.4	Emissies, modelranden, initiële bodemgehalten en overige modelinvoergegevens.	2 — 6
3	Calibratie van het verbeterde SAWES-IMPAQTmodel	3 — 1
3.1	Inleiding	3 — 1
3.2	Beschrijving beschikbare calibratiegegevens	3 — 1
3.3	Beschrijving calibratie	3 — 2
3.3.1	Resultaten berekening met alleen transport	3 — 3
3.3.2	Resultaten berekening met transport en bodem-water- uitwisseling van slib	3 — 3
3.3.3	Resultaten berekening met transport, bodem-water- uitwisseling van slib en verwijderingsprocessen	3 — 4
3.4	Stofbalansen	3 — 6
3.5	Conclusies	3 — 7
4	Aanbevelingen	4 — 1
5	Literatuur	5 — 1

Bijlage A Modeltechnische aanpak in IMPAQT A — 1

Bijlage B Correctie van het transport in de waterkolom in IMPAQT B — 1

Figuren

1 Inleiding en samenvatting.

In 1991 heeft WL in opdracht van en in samenwerking met Rijkswaterstaat, RIKZ, de toenmalige Dienst Getijdewateren, in het kader van het project SAWES (Systeem Analyse WEsterschelde) het waterkwaliteitsmodel van het Schelde-estuarium opgeleverd (van Gils et al., 1991). Onderdeel van het geleverde instrumentarium was een model SAWES-IMPAQT voor de modellering van vijf organische microverontreinigingen (OMIVE), te weten PCB52, PCB153, benzo(a)pyreen (BaP), fluorantheen (Fla) en γ -HCH. De calibratie van dit model is uitgevoerd door RIKZ (Pieters en van Eck, 1994).

De calibratie van SAWES-IMPAQT is door RIKZ op automatische wijze uitgevoerd. Hierdoor werd een groter inzicht verkregen in het gedrag van organische microverontreinigingen in het Schelde estuarium.

Pieters en van Eck (1994) concluderen echter dat met het SAWES-IMPAQT-model de gemeten concentraties en gehalten niet bevredigend zijn te reproduceren. Zij doen een aantal voorstellen voor uitbreiding van de procesformuleringen.

In de voorliggende studie zouden de voorstellen van RIKZ tot wijziging van de modelformuleringen worden geëvalueerd. Bovendien zou worden onderzocht of nog niet door RIKZ voorgestelde wijzigingen soelaas konden bieden. Vervolgens zouden de technische mogelijkheden tot implementatie van de wijzigingen in het huidige modelinstrumentarium onderzocht worden.

Tijdens de studie is echter gebleken dat het model fouten bevatte (in de berekening van enkele invoerparameters en in de source-code) waardoor de te maken evaluatie niet relevant meer was. In plaats daarvan is er voor gekozen de fouten te herstellen en het model handmatig te hercalibreren. Het doel van de hercalibratie was om te kijken of het van fouten ontdane SAWES-IMPAQT model de gemeten concentraties en gehalten wel zou kunnen reproduceren. Dit bleek (potentieel) het geval te zijn. Aanbevolen wordt echter om met het verbeterde model onder SENECA een automatische calibratie uit te voeren en enkele andere modelformuleringen met het model onder DELWAQ 4 uit te proberen.

In het onderhavige rapport wordt het verbeterde SAWES-IMPAQT model beschreven. Het vormt samen met het werkdocument van Pieters en van Eck (1994) de basis van de beschrijving van het SAWES-IMPAQT model in het eindrapport van SAWES MODEL (van Gils et al., 1991).

De studie, waarvoor opdracht is verleend via Opdrachtbonnr. 42941127, is uitgevoerd in het kader van het project SCHOON*WVO. De studie is begeleid door dr G.T.M. van Eck van Rijkswaterstaat, RIKZ te Middelburg en is uitgevoerd en gerapporteerd door drs M.R.L. Ouboter van WL te Delft.

2 Beschrijving van het verbeterde SAWES-IMPAQT model.

In van Zoest (1989) en Pieters en van Eck (1994) bleek het door hen gebruikte IMPAQT-model ongevoelig voor een aantal processen. In de verbeterde SAWES-IMPAQT modelversie is dit niet meer het geval. Het huidige model is daarom weer uitgebreid met enkele processen. Hieronder staan de processen en een beschrijving van de manier waarop ze zijn opgenomen in het huidige verbeterde SAWES-IMPAQT model.

2.1 Processen

De OMIVE komen in drie verschijningsvormen voor: gebonden aan particulier organisch materiaal, gebonden aan opgelost organisch materiaal en vrij in oplossing. De verdeling over deze drie fracties wordt verondersteld bepaald te worden door constante verhoudingen tussen de gehalten in de drie fracties (eenheden respectievelijk $\mu\text{g}/\text{kgPOC}$, $\mu\text{g}/\text{kgDOC}$ en $\mu\text{g}/\text{l}$).

Ieder van de drie genoemde fracties is onderhevig aan andere processen. De particulaire fractie wordt getransporteerd volgens het slibveld (horizontaal transport met termen voor verwijdering van slib uit het systeem) en de twee opgeloste fracties volgens het transport van water. Daarnaast wisselt de particulaire fractie uit met de waterbodem en wisselen de opgeloste fracties uit tussen bodem en water door diffusie. Over het algemeen zijn de opgeloste concentraties in de waterbodem namelijk hoger dan die in de waterkolom door een hogere concentratie van DOC in het poriënwater.

Op de fractie vrij opgeloste OMIVE werkt tenslotte nog een aantal verwijderingsprocessen. In Tabel 2.1 is weergegeven welke processen op de beschouwde OMIVE werken. De gegevens zijn ontleend aan Boderie en Zwolsman (1993).

Tabel 2.1 Verwijderingsprocessen werkzaam op de beschouwde OMIVE

	BaP	Fla	PCB52	PCB153	γ -HCH
vervluchtiging	+	+	+	+	+
fotolyse	+	+	-	-	-
aerobe degradatie	-	+	-	-	+
anaerobe degradatie	-	-	+	+	+

2.2 Procesformuleringen

2.2.1 Algemeen

Het programma IMPAQT (IMPAQT, 1993) draaiend onder DELWAQ is gekozen als instrument voor de modellering van de gekozen organische microverontreinigingen. Een deel van de processen die met IMPAQT beschreven kunnen worden, wordt bij de toepassing voor het Schelde-estuarium gebruikt:

- adsorptie en desorptie aan particulier organisch koolstof (POC) en opgelost organisch koolstof (DOC);
- sedimentatie en resuspensie van de aan POC geadsorbeerde fractie;
- de diffusieve uitwisseling tussen oppervlaktewater en poriënwater;
- vervluchtiging;
- afbraak (eerste-orde) in de waterkolom en in de waterbodem. Voor FLa zijn daarbij fotolyse en degradatie in de waterkolom samengevoegd.

Voor een precieze formulering van deze processen verwijzen we naar IMPAQT (1993), voor het gebruik van DELWAQ naar DELWAQ (1990a en 1990b).

Bij de toepassing van IMPAQT dienen de waterbeweging, de belastingen, het transport van opgeloste stoffen en het transport van slib identiek te zijn aan het model voor zuurstof, stikstof en enkele spoormetalen van het Schelde estuarium DELWAQ-CHARON-DYNAMO (van Gils et al., 1991). Omdat DELWAQ ook in IMPAQT het transport afhandelt, is dat wat betreft de eerste drie punten geen probleem. Slechts de weergave van het transport van zwevend materiaal en de daaraan gebonden stoffen vergt extra aandacht (zie paragraaf 2.2.2).

Daarnaast is in het kader van de IMPAQT-toepassing voor het Schelde-estuarium nog aandacht besteed aan problemen die samenhangen met de balans voor organisch koolstof in IMPAQT (zie paragraaf 2.2.3).

2.2.2 Het transport van de geadsorbeerde fractie

In de IMPAQT-toepassing dient het transport van de geadsorbeerde fractie microverontreinigingen analoog te zijn aan het model DELWAQ-CHARON-DYNAMO. Dit is als volgt gerealiseerd.

Bodem-water-uitwisseling

De IMPAQT-toepassing voor het Schelde-estuarium kent slechts één actieve bodemlaag, die overeenkomt met de halve meter dikke bodem uit de metalenmodellering; de andere twee lagen die deel uitmaken van IMPAQT blijven inert. Verder worden de slibconcentraties in de waterfase voorgeschreven en wordt de sedimentatieflux opgelegd, zodanig dat de actieve bodemlaag de gewenste verblijftijd heeft. Om deze flux te kunnen opleggen is een speciale optie aan de standaardversie van IMPAQT toegevoegd (zie Bijlage A).

Transport in de waterkolom

Het model DELWAQ-CHARON-DYNAMO onderscheidt opgeloste en particulaire stoffen. De opgeloste stoffen worden getransporteerd met de waterbeweging (advectief en dispersief), de particulaire stoffen met de netto slibtransportvelden. In IMPAQT echter wordt alleen de totaalconcentratie van de microverontreinigingen gemodelleerd, zodat verschillende transportmechanismen voor de opgeloste en de particulaire fractie niet direct te realiseren zijn. Om dit probleem op te lossen is een voor dit doel geconstrueerde transportsubroutine aan IMPAQT toegevoegd (zie ook Bijlage B).

2.2.3 Organisch koolstof balans

In de hier gehanteerde beschouwingwijze van het Schelde-estuarium is er een uitwisseling tussen bodem en water door een grote sedimentatieflux van slib en een even grote resuspensieflux. In een situatie waarin dit het enige transportmechanisme is, en verder geen andere processen optreden, geldt bij gelijke particulier gehalten in water en bodem voor een willekeurige organische microverontreiniging dat het transport (in g OMIVE/s) door sedimentatie gelijk is aan het transport door resuspensie.

In formulevorm uitgedrukt:

$$SF \text{ FOC}_{\text{water}} C_{\text{POC,water}} = RF \text{ FOC}_{\text{bodem}} C_{\text{POC,bodem}}$$

SF	=	sedimentatieflux zwevende stof (g droge stof/s)
RF	=	resuspensieflux zwevende stof (g droge stof/s)
FOC	=	fractie organisch koolstof (g OC/g droge stof)
C_{POC}	=	gehalte aan POC (g OMIVE/gOC)

Omdat de sedimentatie en de resuspensie van zwevende stof aan elkaar gelijk zijn ($SF = RF$) moet gelden:

$$C_{\text{POC,water}}/C_{\text{POC,bodem}} = \text{FOC}_{\text{bodem}}/\text{FOC}_{\text{water}}$$

De consequentie hiervan is dat wanneer het organisch koolstof gehalte in het water 2 maal zo hoog is als in de bodem, het gehalte van de toxische stof aan het organisch koolstof in de bodem 2 maal zo hoog is als in de waterfase.

Dit is in tegenspraak met waarnemingen in het gebied, die aangeven dat de gehalten van organische microverontreinigingen in de bodem gelijk of iets lager zijn dan in de waterkolom.

N.B. In deze analyse is ter vereenvoudiging de rol van DOC niet in beschouwing genomen.

De geschetste problemen zijn terug te voeren op een snelle uitwisseling van bodemsediment en zwevende stof met elk een verschillend gehalte organisch koolstof. Dit probleem wordt opgelost door het zwevende stof in de waterfase te verdelen in twee fracties:

- een fractie die voortdurend in de waterkolom is en die bestaat uit 100 % organisch koolstof;
- een fractie met hetzelfde organische koolstofgehalte als het bodemmateriaal die in intensief contact met de bodem is (zandiger materiaal, lagere C_{POC}).

In formulevorm:

$$\begin{aligned} SS_{water} &= SS_a + SS_b \\ POC_{water} &= FOC_a SS_a + FOC_b SS_b \end{aligned}$$

SS	=	zwevende stof concentratie (g/m ³)
POC	=	particulair organisch koolstof concentratie (g/m ³)
FOC	=	fractie organisch koolstof (-)
index a	=	fijne fractie
index b	=	grove fractie

Omdat de grovere fractie dezelfde hoeveelheid organisch koolstof bevat als de bodem zal ook het gehalte van een organische microverontreiniging aan POC in de grove fractie en in de bodem gelijk zijn (bij afwezigheid van andere processen). De concentratie aan POC gemiddeld over beide fracties is:

$$C_{POC,water} = \frac{C_{POC,a} FOC_a SS_a + C_{POC,b} FOC_b SS_b}{FOC_a SS_a + FOC_b SS_b}$$

Deze vergelijking is triviaal als we kiezen:

$$C_{POC,water} = C_{POC,a} = C_{POC,b}$$

Dit houdt feitelijk in dat we aan al het aanwezige POC dezelfde specifieke adsorptiecapaciteit mogen toekennen. Met andere woorden, om de massabalansen voor slib, POC en de daaraan geadsorbeerde microverontreiniging consistent te maken hoeven we slechts aan te nemen dat een gedeelte van het POC in de waterkolom niet aan de bodem-wateruitwisseling deelneemt. Opgemerkt dient te worden dat deze aanname geen invloed heeft op de sedimentatie- en resuspensieflux en op de horizontale transporten. Sedimentatie en resuspensie hebben weliswaar alleen betrekking op de grove fractie, maar tussen de aan de grove en aan de fijne fractie geadsorbeerde stoffen stelt zich telkens instantaan evenwicht in.

De modeltechnische aanpak om de geschetste aanpak binnen IMPAQT te realiseren is weergegeven in Bijlage A.

2.3 Procesparameters

In Tabel 2.2 zijn de relevante procesparameters ondergebracht met een uit de literatuur afgeleide grove inschatting van de range. Bij de calibratie (hoofdstuk 3) zijn parameterwaarden gekozen binnen de genoemde ranges.

Tabel 2.2 Procesparameters modellering OMIVE met uit de literatuur afgeleide ranges.

Procesparameter	BaP	Fla	PCB52	PCB153	γ -HCH
Henry-constante vervluchtiging [Pa.m ³ .mol ⁻¹] (1)	0.04- 0.06	0.5-0.7	10-50	5-35	0.05- 0.18
Temp.constante vervluchtiging [-] (range niet beschouwd)	10.7	20.9	23.2	23.2	23.2
afbraak-constante in waterkolom [dag ⁻¹] (2)	0 - 0.05 ¹	0 - .006 ¹	-	-	.0023 .2 (3)
afbraak-constante in waterbodem [dag ⁻¹] (3)	-	-	1.3e-5	.00019	0.043
sorptie-constante aan POC [log(l/kg)] comb. (1) en (3)	5.3--8.2	4.5--6.5	4.8--6.1	5.5-6.5	3.0--5.9
xDOC [-] (Kdoc/Kpoc)	0.0-1.0	0.0 - 1.0	0.17 (2)	0.17 (2)	0.0-1.0
Moleculaire diffusiecoëfficiënt water [m ² /dag]	1e-4				
Diffusielengte bodem-water-uitwisseling [m]	0.002				

(1): van Zoest, 1989, (2): Zwolsman, 1994, (3): Boderie en Zwolsman, 1993.

¹ gecompenseerd voor fractie vrij opgelost omdat fotolyse werkt op de opgeloste of vrij opgeloste fractie terwijl de overall-afbraakcoëfficiënt werkt op de totaalfractie.

In Tabel 2.3 zijn de voorkeurswaarden ondergebracht die als uitgangspunt zijn gekozen voor de calibratie. De Henry-coëfficiënt voor vervluchtiging en de partitie-coëfficiënt op basis van organisch koolstof (Kpoc) zijn ontleend aan Pieters en van Eck (1994). De overige waarden zijn gebaseerd op de bij Tabel 2.2 genoemde literatuur.

Tabel 2.3 Voorkeurswaarden voor de procesparameters die bij de calibratie zijn beschouwd

Procesparameter	BaP	Fla	PCB52	PCB153	γ -HCH
He vervluchtiging [$\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$]	0.045	0.586	33	11	0.18
k-afbraak waterkolom [dag^{-1}]	0.002	0,001	-	-	.0023
k-afbraak waterhodem [dag^{-1}]	-	-	1.3e-5	.00019	0.0 ¹
Kpoc[$\log(\text{l/kg})$] (Pieters en v.Eck, 1994)	5.92	4.98	5.28	6.29	3.48
xDOC [-] (Kdoc/Kpoc)	0.2	0.2	0.17	0.17	0.6

¹ Anaërobe afbraak van γ -HCH wordt niet gemodelleerd, omdat bij de afbraaksnelheden die in de literatuur genoemd worden de stof in de bodem niet zou kunnen voorkomen, terwijl γ -HCH wel in de bodem wordt gevonden.

2.4 Emissies, modelranden, initiële bodemgehalten en overige modelinvoergegevens.

De emissies (lozingen) in de verbeterde versie zijn hetzelfde als in van Zoest (1989) en Pieters en van Eck (1994). De emissies zijn, samengevat, op de volgende manier uit de schaarse gegevens berekend:

Er is uitgegaan van dezelfde lozingspunten als voor de overige stoffen die gemodelleerd zijn. De punten waarvoor geen enkel gegeven beschikbaar was, zijn daarna niet verder meer beschouwd. Van de overgebleven punten is de belasting per bron bepaald, en uit deze gegevens vervolgens de totale belasting. Daarna zijn alle punten verwijderd waarvan de belasting kleiner was dan 1% van het totaal. De overgebleven 5 punten waar de belasting significant was: de rivier de Schelde (segment 1), het kanaal Gent-Terneuzen en de afvalwaterleiding Terneuzen (segment 13), Spuikanaal Bath (segment 6), en de lozing van Pechiney (segment 14) zijn in Tabel 2.4 vermeld.

(Opmerking: in de belasting nota van Lefevre (1992) staan de kleine emissies wel vermeld).

Tabel 2.4 Overzicht van de belastingbronnen voor organische microverontreinigingen

	BaP	Flu	PCB-52	PCB-153	τ -HCH
Rupelmonde	X	X	X	X	X
spuikanaal Bath	X	X	X	X	X
kanaal Gent-Terneuzen	X	X	X	X	X
AWL Terneuzen	X	X	X	X	
Pechiney	X	X			

De belasting door de Schelde bij Rupelmonde blijkt de belangrijkste bron van OMIVE voor het estuarium. De gegevens voor de vracht zijn herleid uit de metingen van totaalconcentraties bij Schaar van Ouden Doel. De jaargemiddelde totaalconcentraties zijn omgerekend naar een particulier gehalte. Deze is met een factor vermenigvuldigd, die is vastgesteld op grond van in het kader van SAWES uitgevoerde metingen bij Rupelmonde en Schaar van Ouden Doel; deze factor is 1.5 voor de PCB's en 1.2 voor de overige stoffen.

Het particulier gehalte dat zo per jaar berekend is, wordt door vermenigvuldiging met de afvoer bij Rupelmonde en de zwevend-stof-concentratie bij Oosterweel (segment 3) omgerekend naar een variabele maandvracht. Voor γ -HCH bestaat een seizoensafhankelijkheid van de belasting (van Steenwijk et al., 1992). Deze afhankelijkheid is in de belasting door de Schelde bij Rupelmonde gebracht door de jaarvracht proportioneel aan het debiet over het jaar te verdelen.

Pieters en van Eck (1994) concluderen na analyse van de belastingen en van de gemeten concentraties in de segmenten 13 en 14 dat de vracht van het Kanaal Gent-Terneuzen te laag wordt ingeschat; deze is met een factor twee vermenigvuldigd.

Voor de modelrand bij Vlissingen zijn voor de PCB's en de PAK's de gemiddelde concentratie in segment 14 over de jaren 1984-1988 gebruikt. De gekozen randconcentratie van γ -HCH neemt lineair af in de tijd. In Tabel 2.5 zijn de randconcentraties weergegeven. De modelrand bij Rupelmonde wordt in het model als een emissie beschouwd (zie hiervoor).

Tabel 2.5 Concentraties van OMIVE voor de modelrand bij Vlissingen.

stof	concentratie [ng/l]
BaP	5
Fla	19
PCB52	0.5
PCB153	0.35
γ -HCH	18.8 (1984) - 6.8 (1988)

De initiële bodemgehalten zijn gebaseerd op gegevens in het bodembestand van Rijkswaterstaat, Directie Zeeland. De gegevens zijn bewerkt door ze te ontdoen van uitbijters en storend hoge detectielimieten. Aan metingen met een detectielimiet met een reële waarde is een gehalte toegekend van de halve detectielimiet. Vervolgens is er voor gekozen om gegevens te aggregeren voor 4 compartimenten die elk een samenstelling zijn van 4 van de 14 SAWES-segmenten, behalve compartiment 4 dat de segmenten 13 en 14 omvat. Geconcludeerd wordt dat voor de PAK's voldoende gegevens aanwezig zijn. Voor de PCB's zijn weinig gegevens aanwezig van na 1985. De waarden voor particulier gehalten van γ -HCH bestaan vrijwel geheel uit detectielimieten. In Tabel 2.6 zijn voor de 5 OMIVE de gemiddelde gehalten voor de 4 compartimenten weergegeven.

Tabel 2.6 Gemiddelde bodemgehalten [$\mu\text{g}/\text{kgOC}$] met tussen haakjes de standaarddeviatie voor 4 compartimenten in het Schelde-estuarium

compartiment	1 (segment 1-4)	2 (segment 5-8)	3 (segment 9-12)	4 (segment 13-14)
BaP	15000 (5000)	5000 (2000)	5000 (2000)	6000 (3500)
Fla	25000 (5000)	10000 (5000)	10000 (5000)	12500 (5000)
PCB52	325 (75)	150 (50)	75 (50)	80 (40)
PCB153	600 (300)	200 (100)	60 (30)	90 (40)
γ -HCH	250 (150)	90 (50)	85 (40)	85 (35)

De temperatuur, de instraling en de wind zijn onafhankelijke variabelen. De eerste twee zijn opgelegd door een goniometrische functie, voor de wind zijn meetgegevens bij Vlissingen gebruikt. Andere onafhankelijke modelvariabelen zijn de DOC-concentratie (mgC/l) en het POC-percentages in de waterbodem en in de waterkolom, en de concentratie zwevend stof in de waterkolom. In tabel 2.7 zijn de gekozen waarden vermeld. De POC-percentages in de bodem zijn afgeleid uit het bodembestand van Rijkswaterstaat, Directie Zeeland. DOC-, POC- en zwevend stof-concentraties in de waterkolom zijn afgeleid uit de SAWES-meettochten en uit het WORSRO-bestand. De DOC-concentratie van 12.5 mgC/l in het porienwater is uit de beschikbare gegevens afgeleid.

Tabel 2.7 POC-percentages in waterkolom en waterbodem, DOC- en zwevend stof-concentraties in de waterkolom in de 14 segmenten.

segment	waterbodem	waterkolom		
	POC-perc.	POC-perc	DOC [mgC/l]	zwst [mg/l]
1	4.46	7.14	6.59	100
2	4.46	7.14	6.30	100
3	4.46	7.14	5.99	100
4	4.46	7.14	5.68	100
5	2.09	4.83	5.37	70
6	2.09	4.83	5.15	70
7	2.09	4.83	4.69	70
8	2.09	4.83	4.57	70
9	2.09	4.83	4.15	50
10	2.09	4.83	3.79	50
11	2.09	4.83	3.17	50
12	2.09	4.83	2.99	50
13	2.09	4.83	2.77	50
14	2.09	4.83	2.06	50

3 Calibratie van het verbeterde SAWES-IMPACTmodel

3.1 Inleiding

Met de in het vorige hoofdstuk beschreven procesformuleringen voor transport en omzetting is vervolgens een handmatige calibratie uitgevoerd voor de jaren 1984 t/m 1988. Om het model te kunnen calibreren is eerst een analyse gemaakt van de beschikbare meetgegevens van 1984 t/m 1988, op grond waarvan is gedefinieerd welke systeemkarakteristieken met de calibratie gereproduceerd dienden te worden (3.2). Vervolgens is een methodiek voor calibratie gedefinieerd en is de calibratie uitgevoerd. In sectie 3.3 wordt de calibratie beschreven en in sectie 3.4 de stofbalansen, verkregen met het model na afloop van de calibratie-procedure. Conclusies met betrekking tot de calibratie zijn ondergebracht in sectie 3.5.

3.2 Beschrijving beschikbare calibratiegegevens

Er zijn drie soorten meetgegevens beschikbaar:

- De Directie Zeeland van Rijkswaterstaat beheert een bestand met bodemgegevens van het Schelde-estuarium. Uit dit bestand zijn bruikbare gegevens geselecteerd over de kwaliteit van bodemslib (zie ook 2.4). Door Pieters en van Eck (1994) is vastgesteld dat de spreiding in de gehalten groot is. In Tabel 2.6 zijn de gemiddelde en de standaard-afwijking weergegeven. Over de trend in de tijd zijn geen uitspraken te doen zijn. Wel is er een trend in de ruimte, waarbij de gehalten bovenstrooms hoger zijn dan benedenstrooms.
- Door Pieters en van Eck (1994) zijn gegevens verzameld over particulier gehalten in de waterkolom. De meeste van de verzamelde gegevens zijn afkomstig van de SAWES-vaartochten die zijn gehouden in 1987 en 1988. Vanaf 1988 worden in WORSRO ook particuliere gehalten gemeten. De gegevens laten een grote dynamiek zien in tijd en ruimte. Langs de as van het estuarium is dezelfde trend te zien als in de bodem. Van Zoest en van Eck (1990) verklaren de afnemende gehalten bij toenemend zoutgehalte door menging van marien en fluviatiel slib.
- In de reguliere monsterprogramma's van Rijkswaterstaat (WORSRO) en van het Vlaamse IHE worden totaalconcentraties in de waterkolom gemeten. Vooral gegevens gemeten bij Schaar van Ouden Doel zijn beschikbaar. Voor de PAK's en de PCB's is de dynamiek in de totaalconcentraties in de tijd sterk gecorreleerd aan de zwevendstofconcentratie. Deze laat op zijn beurt een seizoensverloop zien (van Eck et al., 1991). Met name in het eerste kwartaal zijn de concentraties hoger dan in de rest van het jaar. De totaalconcentraties van Fla laten een sterker seizoen verloop zien dan BaP en de PCB's. Terwijl voor de laatstgenoemde stoffen deling van de particuliere concentratie door de zwevend-stofconcentratie vrij constante waarden oplevert is dit voor Fla niet het geval. Een verklaring is dat de op Fla werkende verwijderingsprocessen een seizoensafhankelijkheid hebben. De door het model berekende totaalconcentraties van PAK's en PCB's mogen niet direct vergeleken worden met gemeten totaalconcentraties, omdat de zwevendstof-concentratie in hoge mate de totaalconcentratie bepaalt; in het model is de zwevendstof-concentratie constant in de tijd per segment, terwijl de gemeten totaalconcentraties onder invloed staan van sterk wisse-

lende zwevendstof-concentraties. Omdat de zwevendstof-concentratie in het model een gemiddelde is van de veldconcentratie kan de orde-van-grootte van veld- en modelconcentraties wel vergeleken worden.

Totaalconcentraties van γ -HCH moeten anders beoordeeld worden. Deze stof komt voor bijna 100 % voor in de waterfase. Gemeten totaalconcentraties zijn dan ook gelijk aan opgeloste concentraties. De metingen laten een seizoenspatroon zien dat verklaard kan worden uit het seizoensafhankelijk gebruik in de landbouw. In sectie 2.4 werd al beschreven dat deze seizoensafhankelijkheid in de modelrand is ingebracht.

- Opgeloste gegevens zijn vrijwel niet beschikbaar. Omdat de betrouwbaarheid ervan discutabel is (Hermans en Smedes, 1991), zijn ze verder niet gebruikt.

Uit de veldgegevens zijn karakteristieken afgeleid die door het model gereproduceerd dienen te worden. In de figuren met calibratieresultaten (1 t/m 20) zijn de te reproduceren meetgegevens van de jaren 1984 t/m 1988 grafisch weergegeven voor vier compartimenten (segment 1 t/m 4, 5 t/m 8, 9 t/m 12 en 13 en 14). De calibratieresultaten moesten verder de volgende gemeten karakteristieken reproduceren.

- De berekende bodemgehalten moesten vallen binnen de range van de veldgegevens. Bij de presentatie van de modelresultaten wordt een vergelijking gemaakt met het gemiddelde gemeten gehalte plus of min 1 en 2 keer de standaardafwijking. Aangezien uit de metingen geen conclusies waren te trekken over de trend in de tijd is het daarbij toegestaan om al dan niet een berekende trend in de tijd te zien. Als er in geslaagd wordt met het model de ranges in alle compartimenten te reproduceren wordt ook de gehalte-afname in de bodem langs het estuarium goed beschreven.
- De orde van grootte, maar vooral de seizoensdynamiek van de particulier gehalten in de waterkolom moet gereproduceerd worden.
- De orde van grootte van de totaalconcentratie in de waterkolom moet gereproduceerd worden, waarbij het irrelevant is hoe de dynamiek wordt gereproduceerd.

3.3 Beschrijving calibratie

Om een indruk te krijgen van de afzonderlijke bijdragen aan het modelresultaat van de fluxen door transport in de waterkolom, slib-uitwisseling tussen bodem en water en processen zijn modelruns gedraaid met:

- alleen transport en fractionering in de waterkolom,
- transport plus bodem-water-uitwisseling (resuspensie/sedimentatie) van slib, en
- transport, bodem-water-uitwisseling van slib en processen.

Alleen de resultaten van de laatste modelruns worden hier gepresenteerd. Die van de eerste twee worden hieronder slechts in woorden besproken.

3.3.1 Resultaten berekening met alleen transport

Het model kent drie fracties. De particulaire fractie wordt getransporteerd via het slibveld, de DOC-gebonden en de vrij-opgeloste fractie worden getransporteerd met het water. De verdeling over de fracties wordt bepaald door de POC- en de DOC-concentratie (weergegeven in Tabel 2.7) en door de Koc en de Xdoc (Tabel 2.3). Bij de in de tabellen opgegeven waarden treedt fractionering op zoals weergegeven in Figuur 21. Met name BaP en de PCB's hebben een grote fractie geadsorbeerd aan POC. Vooral deze stoffen, maar ook, zij het in mindere mate, Fla worden getransporteerd via het slibveld. γ -HCH komt voor meer dan 99 % vrij opgelost voor.

De transport-berekening geeft een redelijke beschrijving van het gedrag van PCB153 en γ -HCH in de waterkolom. Aangezien met de bodem geen uitwisseling plaatsvindt kunnen over de berekende bodemgehalten geen conclusies worden getrokken. De PAK's hebben te hoge particulier gehalten en totaalconcentraties in met name compartiment 2, waarvoor de meeste metingen aanwezig zijn. Voor PCB52 worden veel te hoge waarden berekend.

3.3.2 Resultaten berekening met transport en bodem-water-uitwisseling van slib

In het Schelde-estuarium is voortdurend sprake van resuspensie en sedimentatie (uitwisseling van bodemslib en slib uit de waterkolom). Bij de opzet van het metalenmodel is uitgegaan van een verblijftijd in de bodem van een half jaar. Uit de gevoeligheidsanalyse van het metalenmodel blijkt dat die verblijftijd in de bodem niet goed te calibreren is met berekeningen van slechts 1 jaar. Daarom is de verblijftijd van slib in de bodem niet op een half jaar gezet maar apart gecalibreerd.

Er zijn twee belangrijke verschillen tussen de resultaten van de berekening met alleen transport in de waterkolom en de berekening met bovendien bodem-wateruitwisseling:

- De slib-uitwisseling tussen bodem en water heeft een nivellerende invloed op de berekende seizoensdynamiek in de particulaire gehalten in de waterkolom, en
- door de bodem-water-uitwisseling veranderen de bodemgehalten; ze gaan daarbij afhankelijk van de grootte van de uitwisseling min of meer lijken op de particulaire gehalten in de waterkolom.

Uit de run valt verder te concluderen dat introductie van de bodem-water uitwisseling van slib de resultaten in compartiment 2 (waarvoor de meeste metingen beschikbaar zijn), verbetert en de berekende seizoensdynamiek beter in overeenstemming is met de metingen dan in de berekening met alleen transport. Voor compartiment drie en vier is de vermindering van de berekende seizoensdynamiek echter niet in overeenstemming met de metingen. De omvang van de bodem-water uitwisseling van slib is dus niet eenduidig. Een verblijftijd van het slib in de bodem van 1 jaar levert de beste overall resultaten op. Deze verblijftijd is hoger dan de verblijftijd in het metalen-model, maar daarin blijken de resultaten weinig gevoelig voor de verblijftijd van slib in de bodem. Met een verblijftijd van 1 jaar worden in het metalen-model kortom bijna dezelfde resultaten gevonden.

Voor de stoffen afzonderlijk volgt uit de run dat de bodem-water-uitwisseling geen enkele invloed heeft op het gedrag van γ -HCH in de waterkolom. De bodemgehalten van γ -HCH worden binnen de ranges berekend die in de bodem gemeten zijn. Voor de PCB's en BaP worden veel te hoge particulier gehalten in de bodem berekend in de meeste compartimenten, ook bij een nog minder intensieve uitwisseling van slib tussen bodem en waterkolom. De particulier gehalten en totaalconcentraties in de waterkolom zijn net als in de transportberekening veel te hoog voor PCB52 en de PAK's. Geconcludeerd wordt dat de verwijderingsprocessen (vervluchting, afbraak) een rol moeten spelen.

3.3.3 Resultaten berekening met transport, bodem-water-uitwisseling van slib en verwijderingsprocessen

De berekeningen met uitsluitend transport en bodem-water-uitwisseling van slib tonen aan dat verwijderingsprocessen een belangrijke rol moeten spelen in de stofbalans. Dit geldt met name voor de PCB's en BaP en in mindere mate voor Fla. Er zijn daarom ook berekeningen uitgevoerd met transport, bodem-water-uitwisseling en processen, waarbij de procescoëfficiënten in eerste instantie de voorkeurswaarde uit Tabel 2.3 hadden. De resultaten uiteindelijk verkregen na afloop van de hele calibratie-procedure zijn in de Figuren 1 t/m 20 vermeld.

De Figuren 1 t/m 4 geven de berekende en gemeten concentraties van γ -HCH in waterkolom en waterbodem weer in de vier compartimenten. De modellering van γ -HCH biedt een goede beschrijving van de veldkarakteristieken, zij het dat de gehalten aan slib in de waterkolom te hoog worden berekend in de compartimenten 3 en 4; er zijn echter maar enkele meetgegevens beschikbaar. Desondanks is de afbraaksnelheid verhoogd. De veldkarakteristieken blijken echter met verschillende afbraaksnelheden voldoende beschreven te kunnen worden. Een lagere afbraak wordt namelijk gecompenseerd door een grotere uitstroming naar de Noordzee en andersom.

De berekende en gemeten Fla-concentraties en gehalten voor de vier compartimenten zijn weergegeven in de Figuren 5 t/m 8. De modellering van Fla met de voorkeurswaarden voor de procesparameters uit Tabel 2.3 levert een redelijke reproductie op van de veldkarakteristieken, zij het dat de totaalconcentratie bij Schaar van Ouden Doel wordt overschat en het in compartiment 4 berekende bodemgehalte de ondergrens van het gemeten gehalte benadert. Om de gevoeligheid van het model voor de randconcentratie bij Vlissingen vast te stellen is vanaf een willekeurig tijdstip (dag 1400) de randconcentratie met een factor 5 vermenigvuldigd. Dit levert een betere beschrijving op van de gehalten in compartimenten 3 en 4 zodat het er op lijkt dat voorbij Vlissingen een bron is vergeten (zie ook BaP en PCB 153).

De totaalconcentraties en gehalten van BaP worden door de processen met parameterwaarden volgens de voorkeurswaarden niet ver genoeg verlaagd; het particulier gehalte in de waterkolom en ook in de waterbodem zijn nog te hoog. Nu is bij de keuze van de voorkeurswaarden de fotolyse van PAK's als onbelangrijk beschouwd. In de literatuur zijn echter voldoende aanwijzingen voor een sterke fotolyse van BaP (Zwolsman, 1994) om de afbraak van BaP in het model te verhogen. De constante genoemd door Zwolsman (1994) is daarom overgenomen en gecorrigeerd voor de fractie opgelost. Fotolyse werkt immers op de opgeloste fractie en bij de vertaling naar een overall-afbraak moet rekening worden gehouden met de fractie opgelost.

Na de aanpassing van de afbraak van BaP is ook de Koc verhoogd om de berekende particulier gehaltes en de totaal-concentratie beter in overeenstemming met de metingen te brengen. In de Figuren 9 t/m 12 is te zien dat de metingen van BaP goed worden gereproduceerd. Alleen in compartiment 4 (segment 13 en 14) wordt uiteindelijk nog een te laag gehalte in zowel bodem als waterkolom berekend. Dit is ook voor de andere stoffen het geval (zie Fl a hierboven). Wellicht wordt een lozing, bijvoorbeeld door slibstoringen, in de buurt van Vlissingen gemist.

PCB52 blijkt bij hantering van de voorkeurswaarden vrijwel in zijn geheel te vervluchtigen. De karakteristieken van de veldgegevens worden goed gereproduceerd. Alleen de dynamiek van gemeten particuliere gehaltes in de waterkolom in compartiment 4 is veel groter dan berekend. De constant gekozen modelrand bij Vlissingen is hier debet aan. Ondanks de goede reproductie van de veldkarakteristieken, zijn toch berekeningen uitgevoerd met andere coëfficiëntwaarden. De vervluchtiging is namelijk zo sterk dat PCB52 wordt geïmporteerd vanuit de Noordzee. Getest is of deze import bij een andere parametersetting te voorkomen is. Daartoe is de Koc verhoogd, zodat de fractie POC- en DOC-gebonden PCB52 verhoogd en de fractie zuiver opgelost verlaagd wordt. Bovendien is de Henry-coëfficiënt voor vervluchtiging verlaagd. Ook bij deze coëfficiënt-waarden treedt import op uit de Noordzee. Import kan overigens een reëel gegeven zijn als de verwijdering in het estuarium groot is terwijl er een lozingsbron voorbij de modelrand bij Vlissingen aanwezig is. In de Figuren 13 t/m 16 zijn de modelresultaten met de gewijzigde parameter setting voor PCB52 weergegeven.

Met de voorkeurswaarden uit Tabel 2.3 blijft het bodemgehalte van PCB153 met name in de compartimenten 2 en 3 veel te hoog. Door de Koc verder te verlagen is het bodemgehalte teruggebracht. Een verdere verlaging van de Koc is niet acceptabel omdat aangenomen moet worden dat de Koc van de zwaardere PCB's hoger is dan die van de lichtere. De verlaging blijkt echter niet voldoende om de bodemgehalten in compartiment 3 binnen het meetbereik te krijgen. Ook een verhoging van de afbraak in de bodem blijkt geen uitkomst te bieden. In de literatuur wordt namelijk een halfwaardetijd van ongeveer 10 jaar genoemd voor anaërobe afbraak in de bodem. Deze snelheid blijkt niet voldoende om de oplading van de bodem te compenseren. Het fenomeen van relatief lage gemeten PCB153 gehaltes in de bodem van compartiment 2 en 3 t.o.v. die in het oppervlakte water is niet goed te begrijpen, temeer omdat PCB153 de enige stof is waarvoor grote verschillen tussen de kwaliteit van slib in bodem en water wordt gemeten. De Figuren 17 t/m 20 geven de uiteindelijke resultaten voor PCB153 in waterkolom en waterbodem weer in vier compartimenten. De bodemgehalten in compartiment 2 en 3 worden niet goed gereproduceerd en net als bij PCB52 is ook de dynamiek van de gemeten particuliere gehaltes in de waterkolom in compartiment 4 veel groter dan berekend. Ook hier wordt een particuliere bron aan de Noordzee zijde gemist.

De na de calibratie verkregen modelparameterwaarden zijn in Tabel 3.1 samengevat. Vetgedrukt zijn de waarden die zijn veranderd t.o.v. de voorkeurswaarden uit Tabel 2.3 waarmee de calibratieprocedure werd begonnen. Die oude voorkeurswaarden zijn (klein) ook nog vermeld.

Tabel 3.1 Model procesparameters na calibratie. De voorkeurswaarden uit Tabel 2.3 waarmee de calibratie procedure is gestart zijn klein weergegeven.

Procesparameter	BaP	Fla	PCB52	PCB153	γ -HCH
He vervluchtiging [$\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$]	0.045	0.586	23.2 (33)	11	0.18
k-afbraak waterkolom [dag^{-1}]	.0175 (.002)	0.001	-	-	.0046 (.0023)
k-afbraak waterbodem [dag^{-1}]	-	-	1.3e-5	.00019	0.0
Kpoc[log(l/kg)] (Pieters en van Eck, 1994)	6.5 (5.92)	4.98	5.6 (5.28)	5.8 (6.29)	3.48
xDOC [-] (Kdoc/Kpoc)	0.2	0.2	0.17	0.17	0.6

3.4 Stofbalansen

In Tabel 3.2 zijn van de na de calibratie verkregen modelversie de balanst termen voor de OMIVE in de waterkolom weergegeven voor het hele modelgebied voor de hele gemodelleerde periode van 5 jaar.

Geconcludeerd kan worden dat de retentie van de PCB's in het estuarium vrijwel 100 % is, voor BaP 70 %, en voor Fla en γ -HCH minder dan 50 %. De door het model berekende retentie voor de PCB's is hierbij hoger dan de retenties voor PCB's berekend door Klamer et al. (1992), die varieert tussen 25 en 83%.

Tabel 3.2 Balanstermen OMIVE waterkolom

balanst erm	BaP kg/5yr	Fla kg/5yr	γ -HCH kg/5yr	PCB52 kg/5yr	PCB153 kg/5yr
berging	-47	-391	-48	0	0
afbraak (fotolyse en/of biodegradatie)	-1659	-553	-493	0	0
diffusie vanuit de bodem	339	478	9	6	7
transport naar de bodem (waarbij bodem oplaadt)	-18	-256	-1	-10	-31
vervluchtiging	-7	-3392	-291	-132	-91
belasting	3247	12162	2011	133	158
slibonttrekking	-933	-1561	-13	-22	-35
uitstroming	-922	-6486	-1175	24	-8
retentie	71,6	46,7	41,6	118,4	94,9

3.5 Conclusies

Na de uitgevoerde model calibratie kan geconcludeerd worden dat het verbeterde SAWES-IMPAQT model in principe de in de jaren 1984 t/m 1988 gemeten gegevens kan reproduceren. Dit kan vrijwel zeker door verschillende procesparametersettings. Over de stoffen afzonderlijk kan het volgende worden gezegd.

Het model laat zien dat het gedrag van γ -HCH in de waterkolom met alleen het watertransport goed is te beschrijven. Voor γ -HCH zijn verder met name in de compartimenten 3 en 4 te weinig gegevens beschikbaar om uitspraken te doen over de grootte van de verwijdering (biodegradatie) in de waterkolom.

Het model laat voor PCB 153 zien dat de meetgegevens redelijk met alleen het slibtransport vallen te beschrijven. De gemeten gehalten zijn dus te verklaren met alleen menging van fluviatiel zwevend materiaal met hoge en marien zwevend materiaal met lage gehalten. Op het moment dat de bodem-water-uitwisseling van slib wordt aangenomen, moet voor PCB153 echter ook de verwijdering door vervluchtiging in beschouwing worden genomen om de gehalten in de bodem niet te hoog te laten worden. Om deze hoeveelheid goed te beschrijven moest ook de Koc worden verlaagd, zodat de particulier gehalten lager worden en de verwijdering door vervluchtiging groter. Uiteindelijk kan het lage gemeten gehalte in de bodem van compartiment 2 en 3 kan echter nog steeds niet gereproduceerd worden.

Met alleen transport is het gedrag van PCB52 en de PAK's niet goed te beschrijven. De aanname van vervluchtiging van Fla levert betere modelresultaten op; de totaalconcentratie in de waterkolom bij Schaar van Ouden Doel wordt uiteindelijk echter nog steeds overschat.

Voor PCB52 en BaP zijn de aanwijzingen voor verwijderingsprocessen het sterkst. Uitgaande van alleen transport aangevuld met bodemwater-uitwisseling worden veel te hoge waarden in zowel bodem als waterkolom berekend in de compartimenten 2 en 3. Vervluchtiging van PCB52 en fotolyse van BaP met coëfficiënten uit de literatuur dragen bij aan een goede beschrijving van de gemeten veldkarakteristieken.

Voor PCB52 is verder de dynamiek in de metingen aan de zoute kant groter dan in de berekeningen. De constante modelrand bij Vlissingen is hier vrijwel zeker debet aan en zou moeten worden vervangen door een tijdserie, zij het dat de gegevens om deze tijdserie op te baseren gering zijn.

Voor met name PCB153, BaP en Fla wordt verder in de omgeving van de modelrand bij Vlissingen een bron gemist wordt. Dat het juist de particulier bindende stoffen zijn waar dit voor geldt, doet vermoeden dat de gemiste bron particulier van aard is.

4 Aanbevelingen

Het verbeterde SAWES-IMPAQT model is in principe in staat om de gemeten concentraties en gehalten van de gemodelleerde stoffen te reproduceren. Tijdens de calibratie-procedure is echter ook duidelijk geworden dat vergelijkbare concentraties en gehalten berekend kunnen worden bij andere coëfficiënt-instellingen. De eerste en belangrijkste aanbeveling is dan ook om een automatische calibratie uit te voeren met het huidige verbeterde SAWES-IMPAQT model onder SENECA.

Parameters die aan autocalibratie onderworpen kunnen worden zijn: Koc, Xdoc, afbraak in de waterkolom (door fotolyse en biodegradatie samen), Henry-coëfficiënt voor vervluchtiging, verblijftijd van organisch koolstof in de bodem (sedimentatieflux) en eventueel de lozing door de Schelde bij Rupelmonde. De bodemgehalten waarop gecalibreerd wordt zouden met name voor PCB 153 heroverwogen moeten worden. Wellicht zijn de lage gehalten uit de range niet representatief voor de bodem waarmee de waterkolom uitwisselt. Naast op de immissiegegevens zelf zou ook gecalibreerd kunnen worden op de ratio's tussen de twee PAK's en de twee PCB's.

Het is verder belangrijk zich er rekenschap van te geven dat met autocalibratie de juistheid van het model concept zelf niet wordt onderzocht. Relevante fenomenen die niet in het modelconcept zijn gevat worden bij de optimalisatie vertaalt in waarden van de beschikbare coëfficiënten die daarmee een deel van hun realiteitswaarde zullen verliezen. De tweede aanbeveling is dan ook om enkele tijdens onderhavige studie naar voren gekomen modelalternatieven uit te testen. De meest belovende daarvan is de introductie van langzame desorptie via een particuliere fractie die niet continu uitwisselt met de opgeloste en bodemfracties maar conservatief naar de Noordzee wordt getransporteerd. In de nieuwe versie van DELWAQ, DELWAQ 4 zijn dit soort modelexercities eenvoudig te realiseren.

5 Literatuur

- Boderie, P.M.A. en J.J.G. Zwolsman, 1993.
Uitbreiding model Stofstromen.
Waterloopkundig Laboratorium, Delft. Rapport T1020.
- DELWAQ, 1990a.
Manual DELWAQ, Users Manual, Version 3.0.
Delft Hydraulics, Delft, March 1990.
- DELWAQ, 1990b.
Manual DELWAQ, Technical Reference, Final Draft.
Delft Hydraulics, Delft, January, 1990.
- Hermans, J.H. en Smedes, F., 1991.
Onderzoek naar de monsternamen en bepaling van OMIVE (PCB's en PAK's) in oppervlakte water.
Rijkswaterstaat, DGW, Haren (Gr.). Nota GWIO-91.060.
- Klamer, J.C., van Zoest, R., Laane, R.W.P.M. and van Eck, G.T.M., 1992.
Estuaries as a filter for organic micropollutants. Case study of PCBs in the Rhine and Scheldt.
Paper presented at ECSA 22, Plymouth University, Plymouth, UK.
- Lefevre, F.O.B., 1992.
Ontwikkeling in de belasting en de waterkwaliteit van het Schelde-estuarium in de periode 1980-1991.
RSW, Dienst Getijdewateren, Middelburg. Nota DGW 92.042.
- IMPAQT, 1993.
IMPAQT, Users Manual, version 4.0.
Delft Hydraulics, Delft, 1993.
- Pieters, J. en van Eck, G.T.M., 1994.
Calibratie IMPAQT.
Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Kust en Zee (RIKZ). Werkdocument RIKZ/OS-94.811x.
- van Eck, G.T.M., de Pauw, N., Van Den Langenbergh, M. en Verreet, G., 1991.
Emissies, gehalten, gedrag en effecten van (micro)verontreinigingen in het stroomgebied van de Schelde en Schelde-estuarium. Water 60, 164-181.
- van Gils, J.A.G., Ouboter, M.R.L. en de Rooij, N.M., 1991.
Waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium.
Waterloopkundig Laboratorium, Delft. SAWES-Nota 91.01, concept.
- van Steenwijk, J.M., Lourens, J.M., van Meerendonk, J.H., Phernambucq, A.J.W. en Barreveld, H.L., 1992.
Speuren naar sporen I. Verkennend onderzoek naar milieuschadelijke stoffen in de zoete en zoute watersystemen van Nederland. Metingen 1990-1991. Nota RIZA 92.057/ Rapport DGW 92.040.
- van Zoest, R., 1989.
Gehalten, gedrag en modellering van organische microverontreinigingen in water en bodem van het Schelde estuarium.
RWS, Dienst Getijdewateren, Middelburg. Nota GWAO-89.023, SAWES-Nota 90.01.
- van Zoest, R., and van Eck, G.T.M., 1990.
Behaviour of particulate polychlorinated biphenyls and polycyclic aromatic hydrocarbons in the Scheldt estuary. Netherlands Journal of Sea Research 26 (1): 89-96.
- Zwolsman, J.J.G., 1994.
Contaminant filtering of North Sea estuaries.
Delft Hydraulics, Delft. Report T1233

Bijlagen

Bijlage A Modeltechnische aanpak in IMPAQT

Om de in paragraaf 2.2.3 van de hoofdtekst beschreven aanpak modeltechnisch in IMPAQT tot stand te brengen, zonder de noodzaak te hoeven programmeren, kunnen we als volgt te werk gaan.

We modelleren de fijne slibfractie zogenaamd als algen en zetten de mortaliteit en de sedimentatie daarvan op nul. We wijzen er met nadruk op dat dit conceptueel niet inhoudt dat alle POC dat niet met de bodem uitwisselt in algen zit. Het is slechts een 'truc' om de gewenste methodiek tot stand te brengen zonder aan IMPAQT te hoeven sleutelen.

Algen hebben in IMPAQT een fractie organisch koolstof van 1.0. De hoeveelheid algen kan daarom zeer eenvoudig worden bepaald op grond van het verschil in organisch koolstof tussen water en bodem en de totale hoeveelheid zwevende stof:

$$SS_a = SS_b (FOC_{water} - FOC_{bodem}) / (1.0 - FOC_{water})$$

SS	=	zwevende stof concentratie (g/m ³)
FOC	=	fractie organisch koolstof (-)
index a	=	fijne fractie
index b	=	grove fractie

De te kiezen hoeveelheid algen is nul als de hoeveelheid organisch materiaal in de bodem en in de waterkolom gelijk is. Als de bodem helemaal geen organisch stof bevat dan is de hoeveelheid algen gelijk aan $SS * FOC_{water}$; al het organisch materiaal in de waterfase zit in de algen.

N.B. In de toepassing van IMPAQT op het Schelde-estuarium spelen de algen geen rol. Het is daarom geen probleem de algen te gebruiken op de boven beschreven wijze.

Invoergegevens voor het model

De invoer van het model dient ten opzichte van de standaardversie van IMPAQT op de volgende punten te worden gewijzigd:

Blok 7 van de invoer:

- De 2-e constante moet gelijk worden aan 2.0. Dit is een optie die speciaal voor deze toepassing aan IMPAQT is toegevoegd. De optie is identiek aan de waarde 1.0, behalve dat in plaats van de sedimentatiesnelheid van zwevend slib (in m/dag) de sedimentatieflux (in g/m².dag) kan worden opgegeven.
- De 5-e constante (vaste stofdispersie) kan 0.0 worden gekozen teneinde bodemlaag 2 en 3 niet mee te laten doen. De 8-e constante (vloeistofdispersie) kan een zeer lage waarde hebben (b.v. 1E-10) om dezelfde reden.
- De conversiefactoren voor chlorofyl (constanten 9 en 10) moeten 1.0 zijn om algen te beschouwen als 100% organisch koolstof.
- De mortaliteit van algen (constante 11) MOET nul zijn.

- De valsnelheid van slib (parameter 20) moet als constante 2 een waarde 2.0 heeft worden vervangen door de gewenste bodem-wateruitwisselingsflux in g/m².dag.
Deze flux berekenen we als:

$$\begin{aligned} \text{flux (g/m}^2\text{.dag)} &= \\ &\text{dikte bodemlaag (m)} * (1 - \text{porositeit}) \\ &\quad * \text{soortelijke massa vaste stof (g/m}^3\text{)} \\ &\quad * \text{fractie slib in de bodem (-)} \\ &\quad / \text{verblijftijd (dagen)} \end{aligned}$$

De fractie slib in een modelsegment uit bovenstaande formule is geen modelvariabele. Om de fractie slib in rekening te brengen wordt de soortelijke massa in de bodem (de 4-e constante) vermenigvuldigd met de fractie slib en het resultaat hiervan ingevuld onder soortelijke massa.

- De dikten van bodemlagen 1, 2 en 3 zijn ongeveer 0.5, 9.5 en 10.0 meter (de laatste 2 getallen zijn alleen van betekenis als de vaste stofdispersie en vloeistofdispersie niet zijn uitgeschakeld).
- De fractie organisch koolstof in de waterkolom MOET gelijk zijn aan de fractie organisch koolstof in de bodem.
- De valsnelheid van de algen MOET gelijk zijn aan 0.0.
- De algenconcentratie (segmentsfunctie 1) moet worden berekend volgens de eerste formule van Bijlage A.

Bijlage B Correctie van het transport in de waterkolom in IMPAQT

De standaard advectieve en dispersieve transporten in DELWAQ resulteren in de volgende transporten over de vakgrenzen:

$$T_{\text{normaal}} = Q C_{T,1} + (D A / L) (C_{T,1} - C_{T,2})$$

T	= transport (g/s)
C	= concentratie
A	= doorsnede (m ²)
L	= dispersielengte (m)
index T	= totaal concentratie (g/m ³)
index O	= opgeloste concentratie (g/m ³)
index P	= particulier gehalte (g/g)
index 1	= bovenstroomse element
index 2	= benedenstroomse element

Het gewenste transport is (volgens de in paragraaf 5.4 van het SAWES-MODEL-rapport (van Gils et al., 1991) uitgewerkte zienswijze):

$$T_{\text{gewenst}} = Q C_{O,1} + D A / L (C_{T,1} - C_{T,2}) + T_f C_{P,1} - T_m C_{P,2}$$

In deze formule is de dispersieve term van toepassing op totaalconcentraties. Het effect van de dispersie op het transport van particulaire stoffen komt namelijk niet tot uitdrukking bij gebruik van de netto slibtransportvelden alleen.

Ten behoeve van de huidige IMPAQT-toepassing op het Schelde-estuarium is een speciale transportroutine geconstrueerd en aan IMPAQT toegevoegd. Deze routine berekent een additioneel transportveld ter grootte van:

$$T_{\text{correctie}} = T_{\text{gewenst}} - T_{\text{normaal}}$$

$$T_{\text{correctie}} = Q (C_{O,1} - C_{T,1}) + T_f C_{P,1} - T_m C_{P,2}$$

FIGUREN

Legenda



gemiddelde + 2.st.dev.

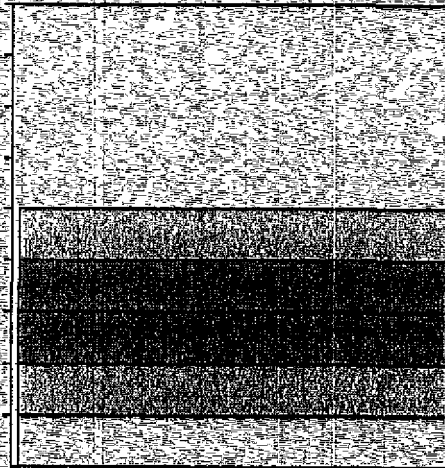
gemiddelde + 1.st.dev.

gemeten gemiddelde

gemiddelde - 1.st.dev.

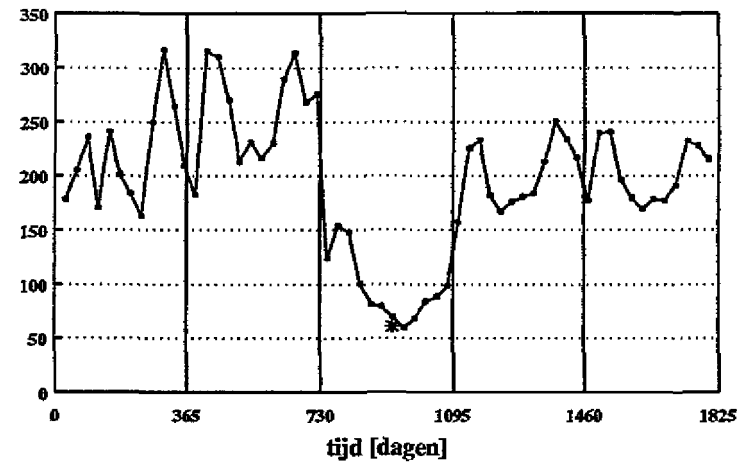
gemiddelde - 2.st.dev.

meetruimes bodemgehalten



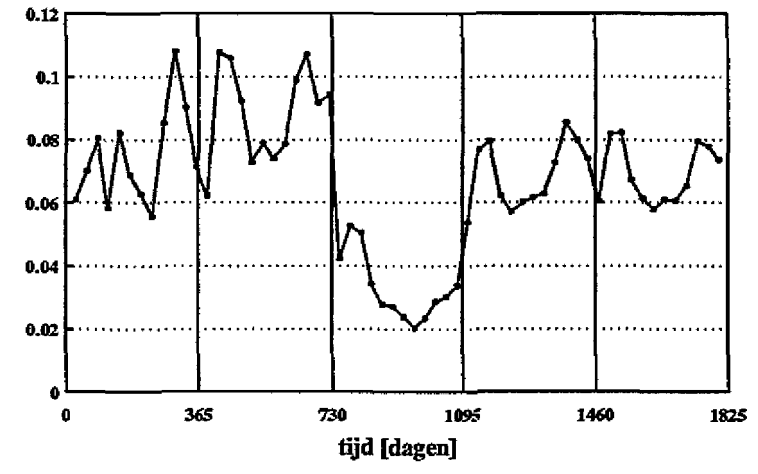
Figuur 1

c-HCH slibkwaliteit waterkolom
compartiment 1
[ug/kgOC]



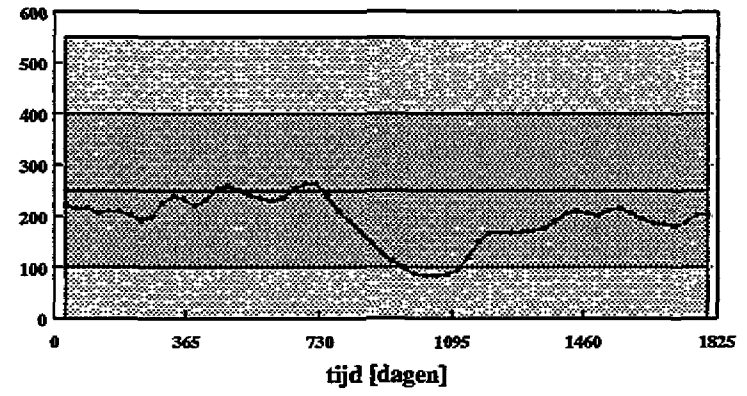
ijk14

c-HCH totaalconc. waterkolom
compartiment 1
[ug/l]



ijk14

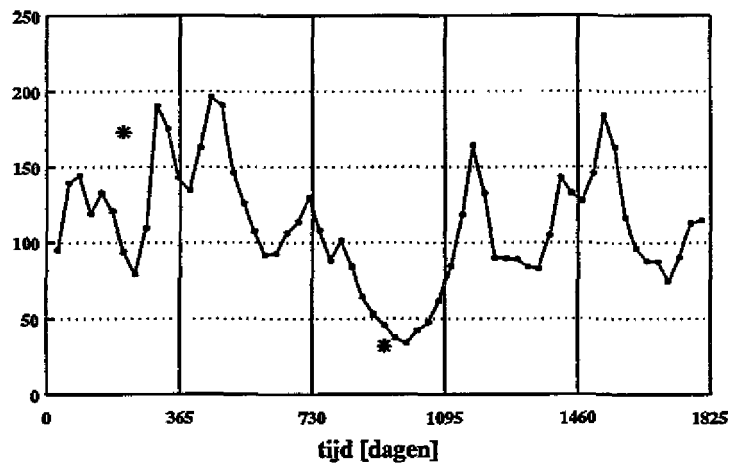
c-HCH slibkwaliteit waterbodem
compartiment 1
[ug/kgOC]



ijk14

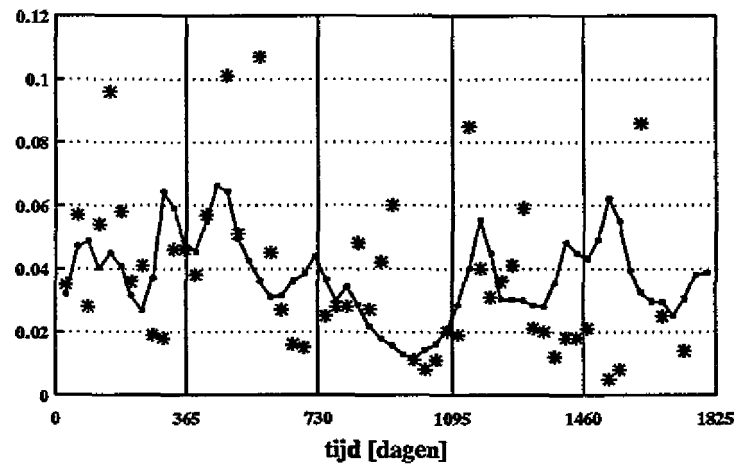
Figuur 2

c-HCH slibkwaliteit waterkolom
compartment 2
[µg/kgOC]



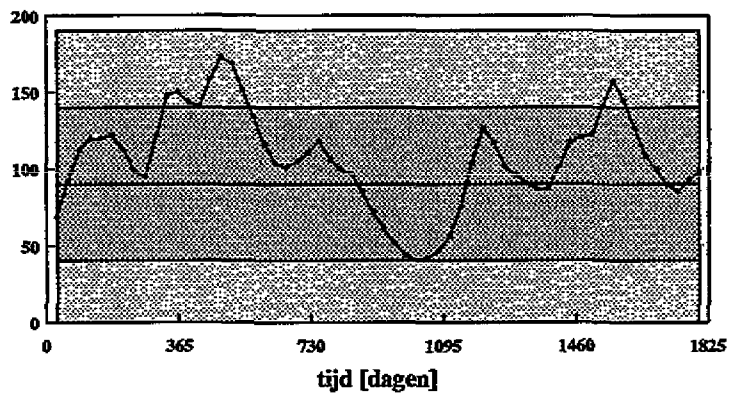
ijk14

c-HCH totaalconc. waterkolom
compartment 2
[µg/l]



ijk14

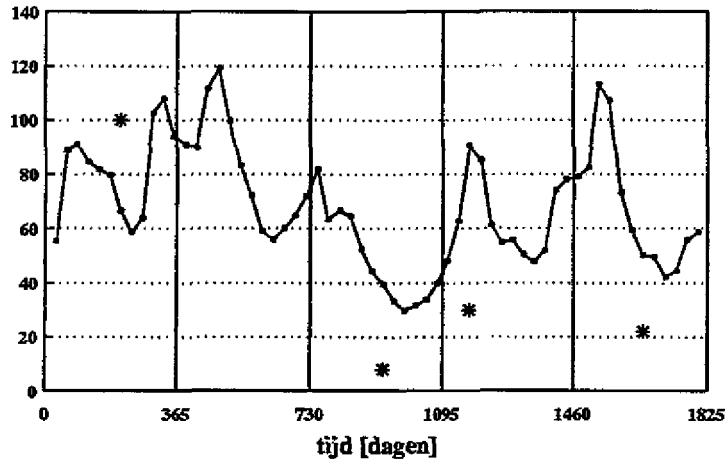
c-HCH slibkwaliteit waterbodem
compartment 2
[µg/kgOC]



ijk14

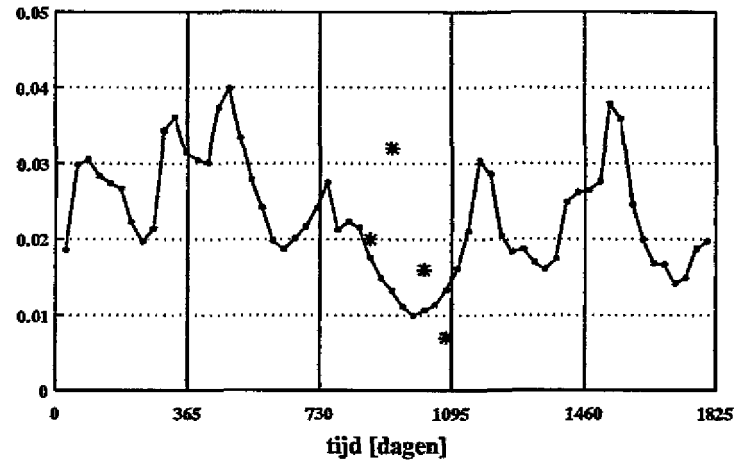
Figuur 3

c-HCH slibkwaliteit waterkolom
compartment 3
[µg/kgOC]



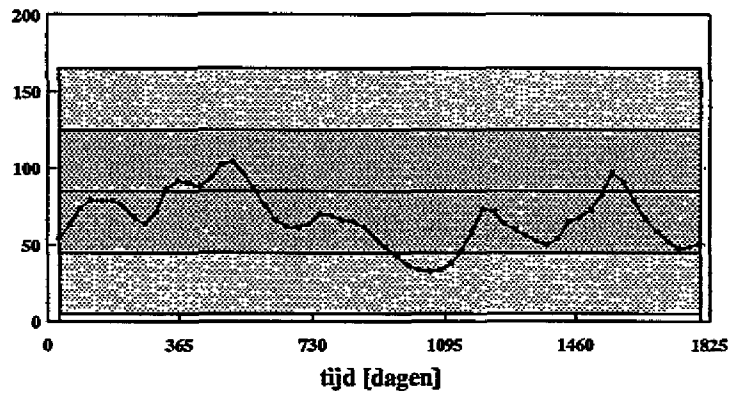
IJK14

c-HCH totaalconc. waterkolom
compartment 3
[µg/l]



IJK14

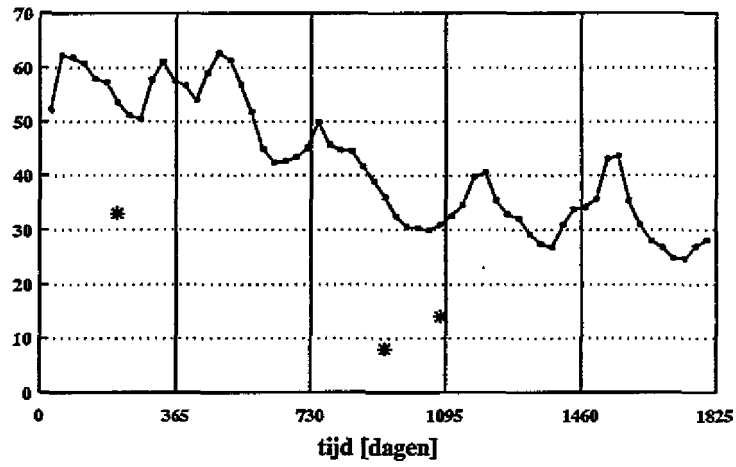
c-HCH slibkwaliteit waterbodem
compartment 3
[ng/kgOC]



IJK14

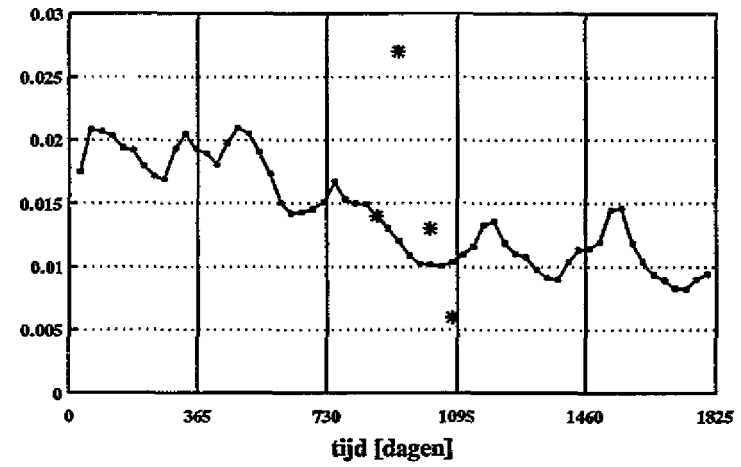
Figuur 4

c-HCH slibkwaliteit waterkolom
compartment 4
[ug/kgOC]



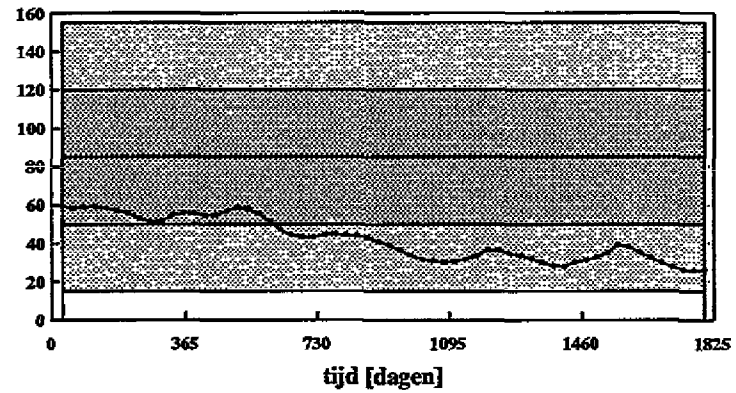
ijk14

c-HCH totaalconc. waterkolom
compartment 4
[ug/l]



ijk14

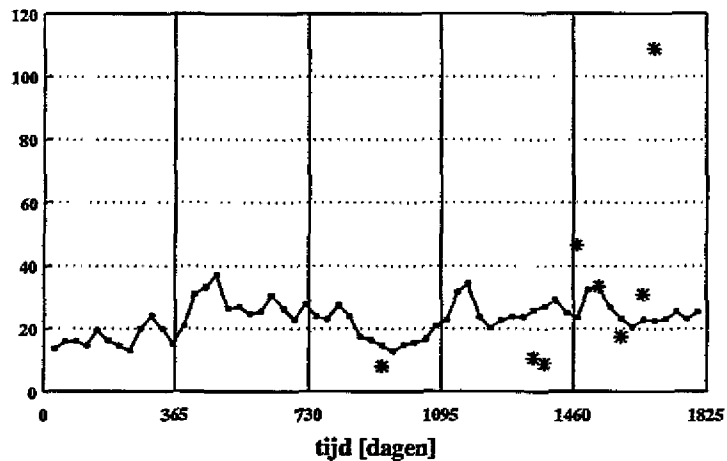
c-HCH slibkwaliteit waterbodem
compartment 4
[ug/kgOC]



ijk14

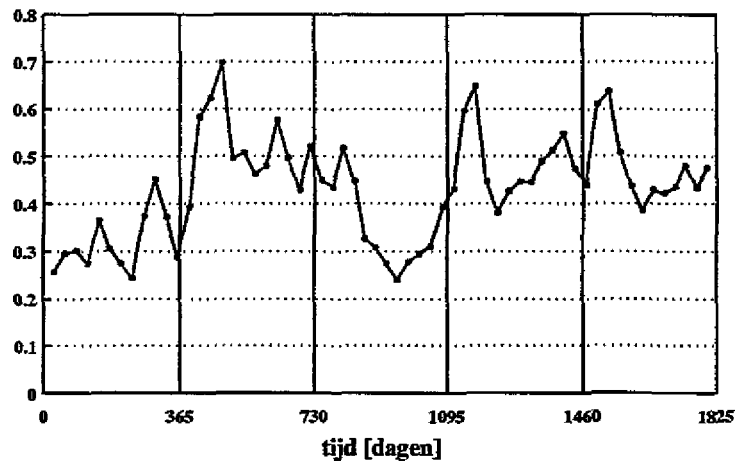
Figuur 5

Fla slibkwaliteit waterkolom
compartment 1
[mg/kgOC]



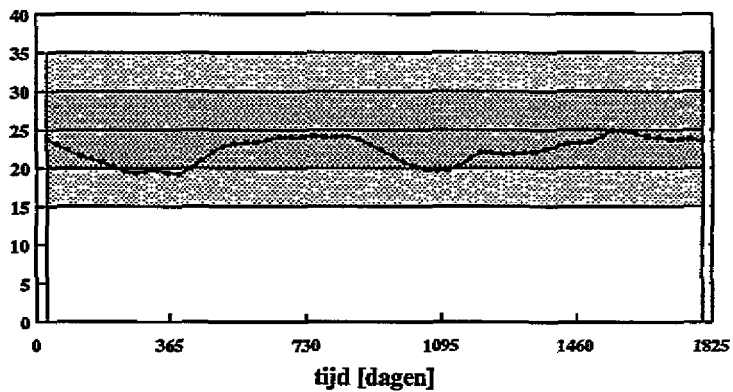
ijk14

Fla totaalconc. waterkolom
compartment 1
[mg/l]



ijk14

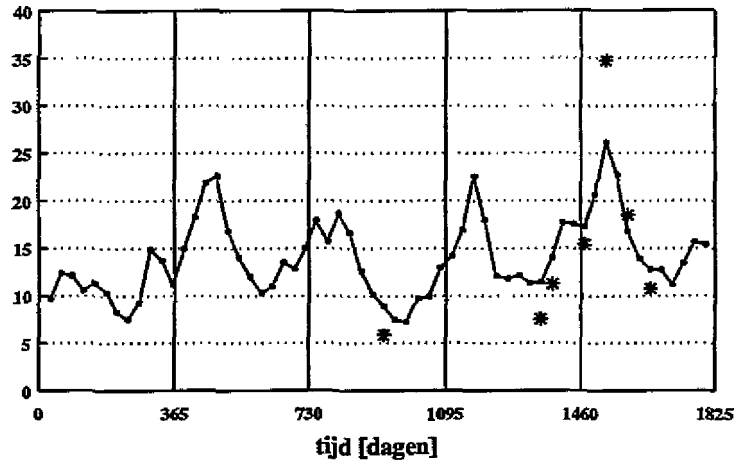
Fla slibkwaliteit waterbodem
compartment 1
[mg/kgOC]



ijk14

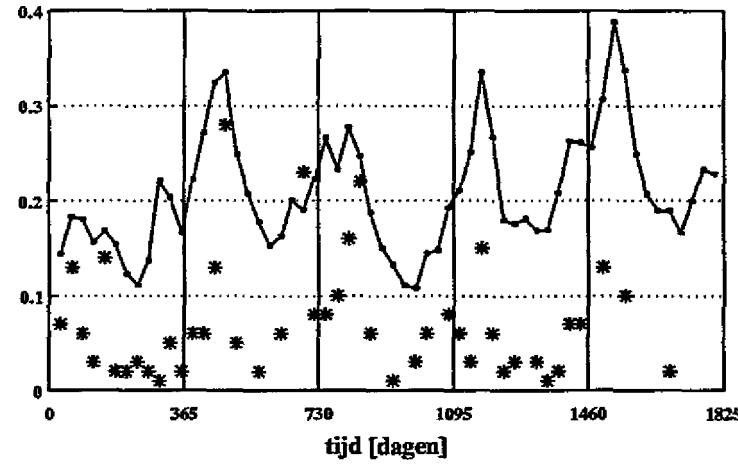
Figuur 6

Fla slibkwaliteit waterkolom
compartment 2
[mg/kgOC]



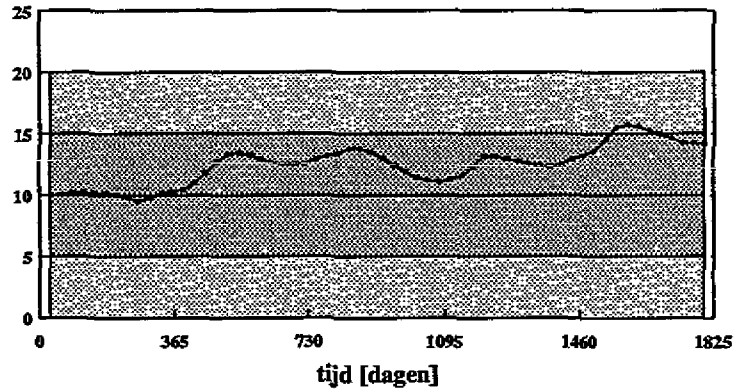
tjk14

Fla totaalconc. waterkolom
compartment 2
[mg/l]



tjk14

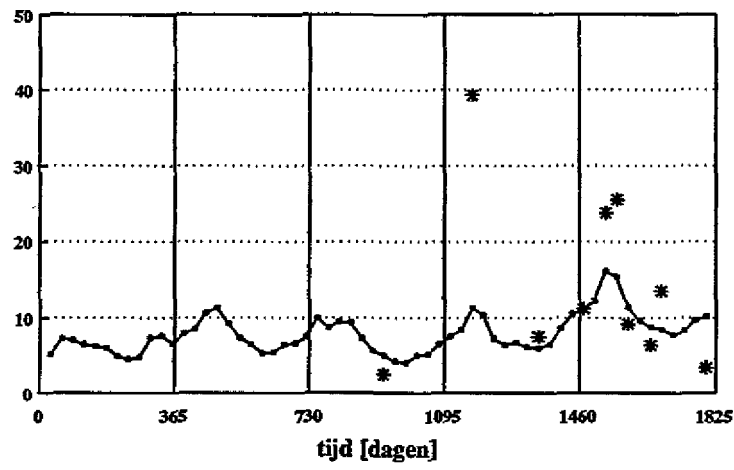
Fla slibkwaliteit waterbodem
compartment 2
[mg/kgOC]



tjk14

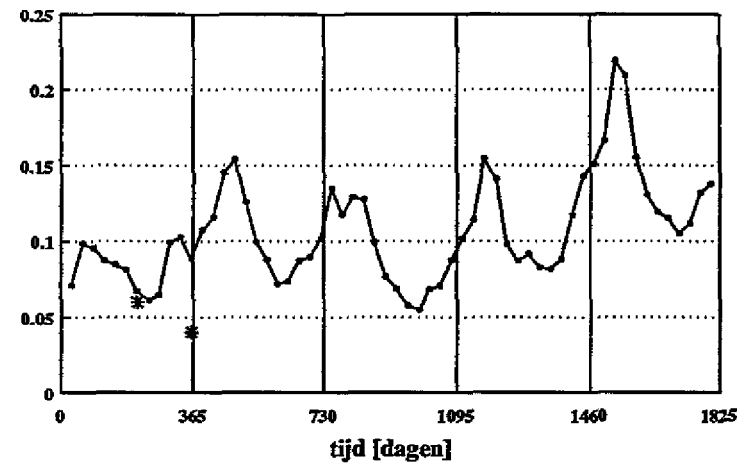
Figuur 7

Fla slibkwaliteit waterkolom
compartiment 3
[mg/kgOC]



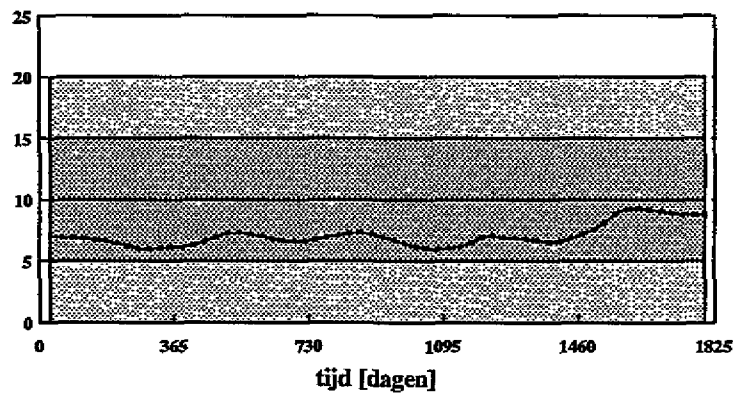
IJK14

Fla totaalconc. waterkolom
compartiment 3
[mg/l]



IJK14

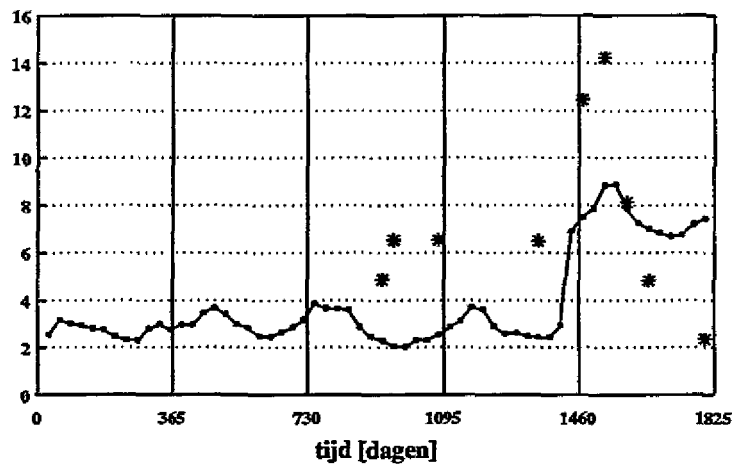
Fla slibkwaliteit waterbodem
compartiment 3
[mg/kgOC]



IJK14

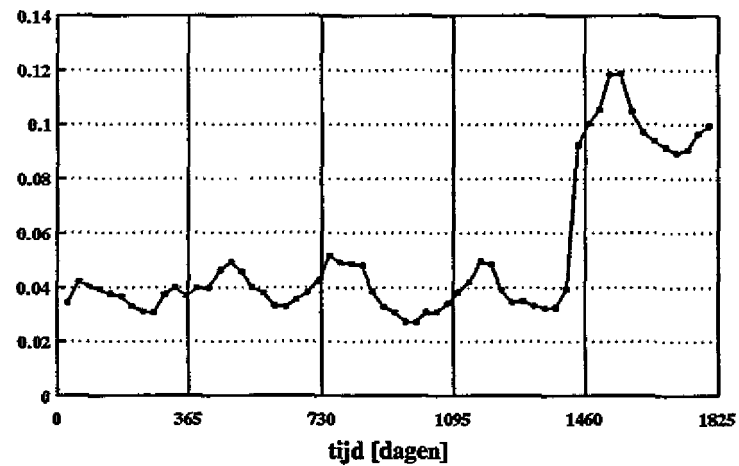
Figuur 8

Fla slibkwaliteit waterkolom
compartment 4
[mg/kgOC]



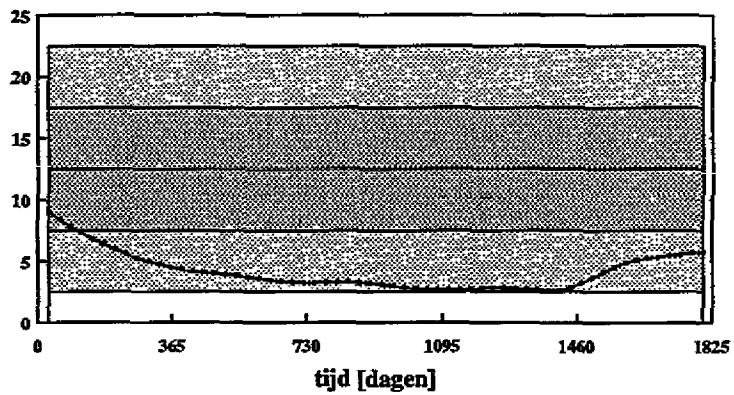
ijk14

Fla totaalconc. waterkolom
compartment 4
[mg/l]



ijk14

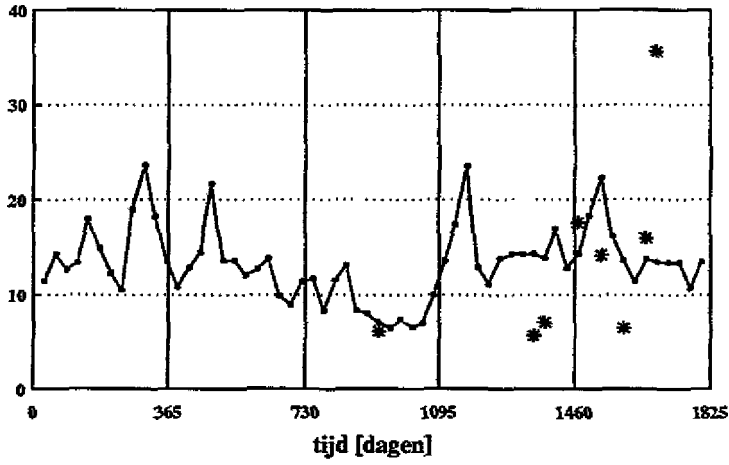
Fla slibkwaliteit waterbodem
compartment 4
[mg/kgOC]



ijk14

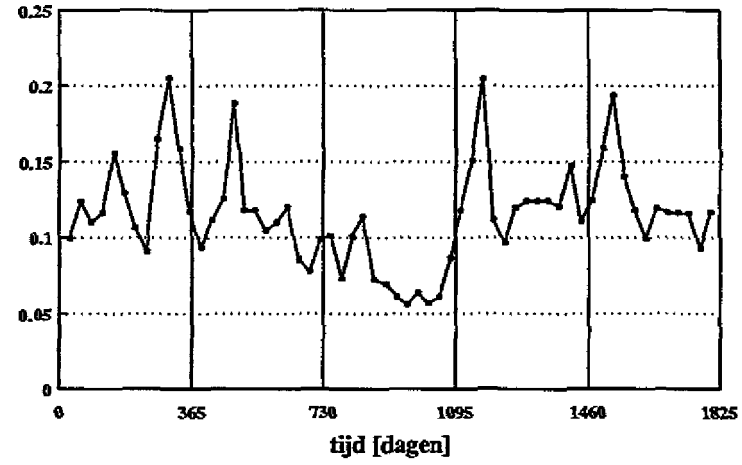
Figuur 9

BaP slibkwaliteit waterkolom
compartment 1
[mg/kgOC]



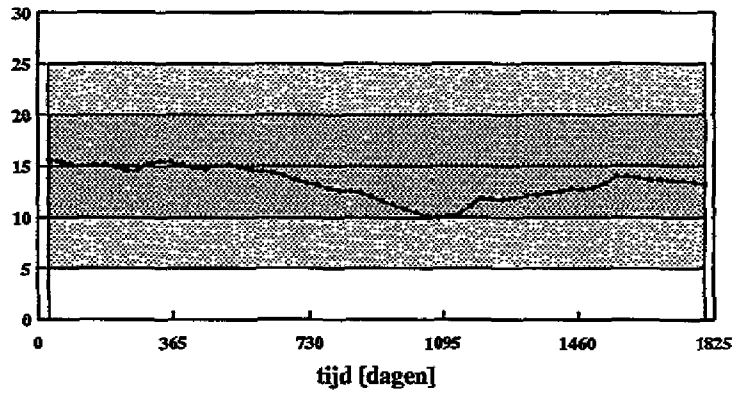
ijk14

BaP totaalconc. waterkolom
compartment 1
[mg/l]



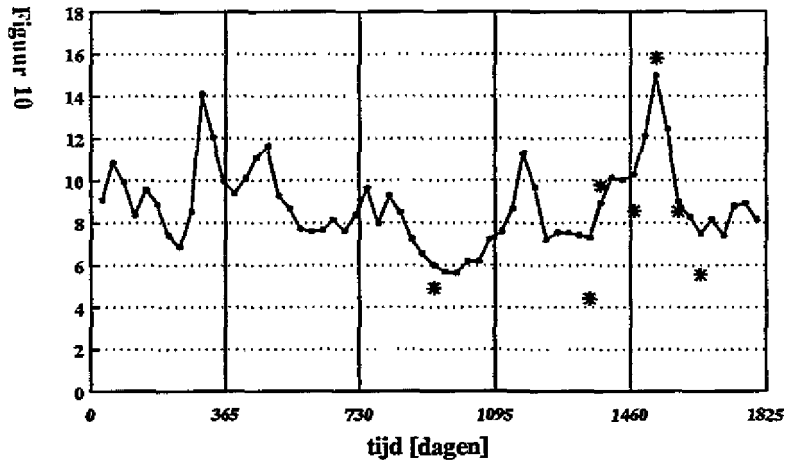
ijk14

BaP slibkwaliteit waterbodem
compartment 1
[mg/kgOC]



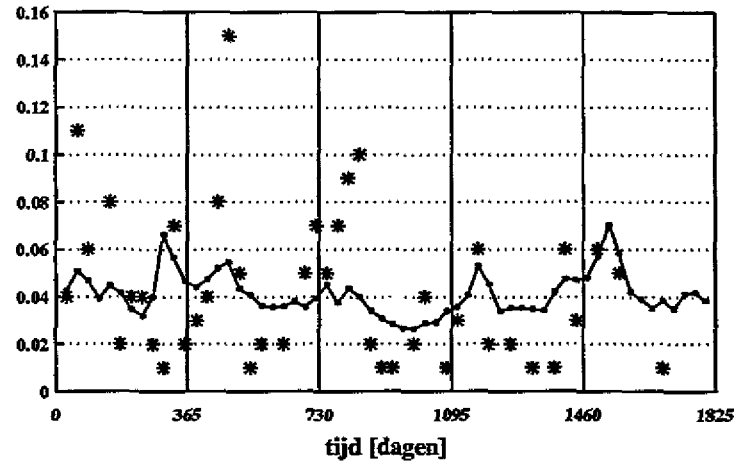
ijk14

BaP slibkwaliteit waterkolom
compartment 2
[mg/kgOC]



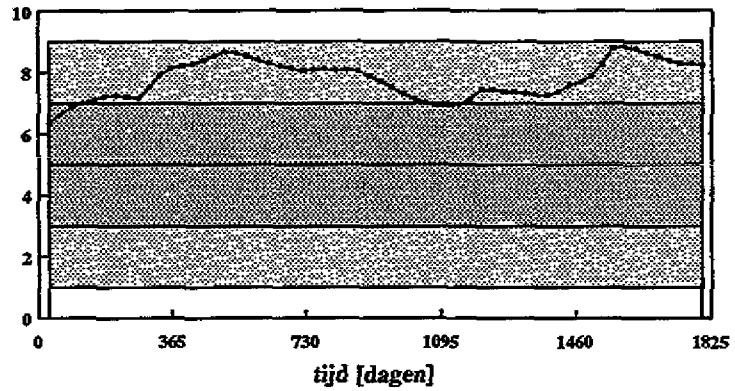
ijk14

BaP totaalconc. waterkolom
compartment 2
[mg/l]



ijk14

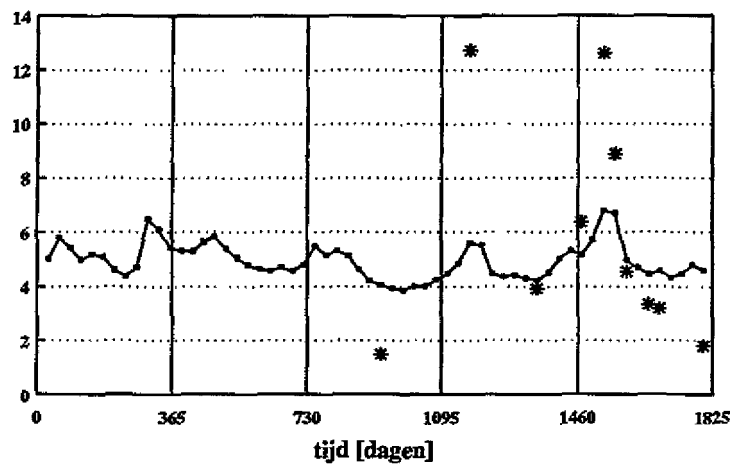
BaP slibkwaliteit waterbodem
compartment 2
[mg/kgOC]



ijk14

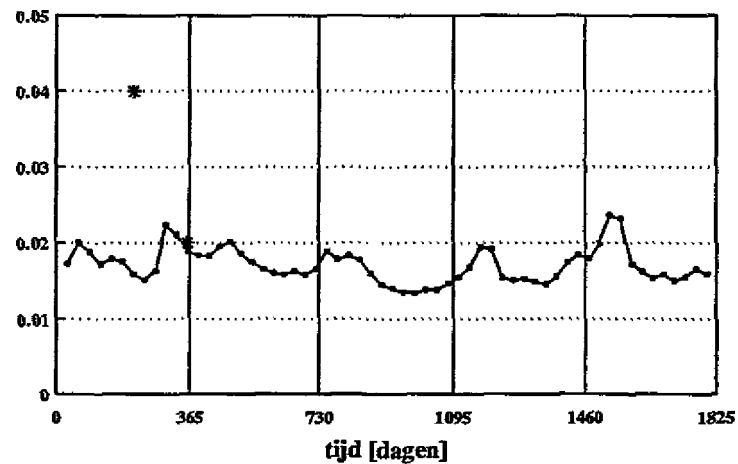
Figuur 11

BaP slibkwaliteit waterkolom
compartiment 3
[mg/kgOC]



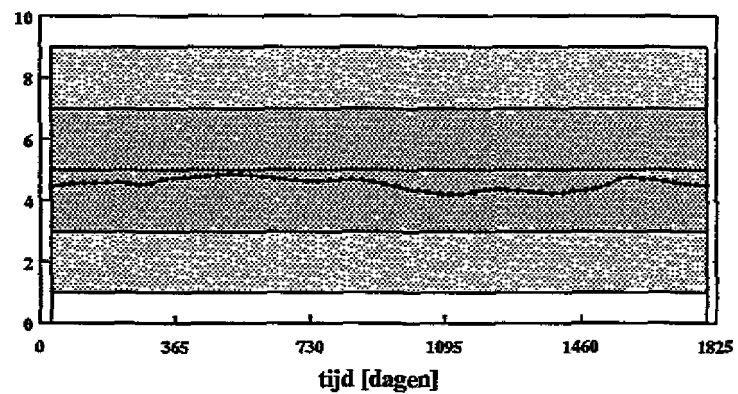
ijk14

BaP totaalconc. waterkolom
compartiment 3
[mg/l]



ijk14

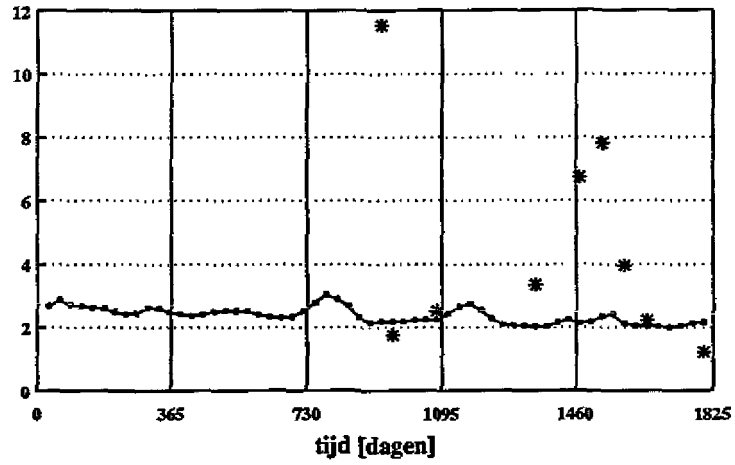
BaP slibkwaliteit waterbodem
compartiment 3
[mg/kgOC]



ijk14

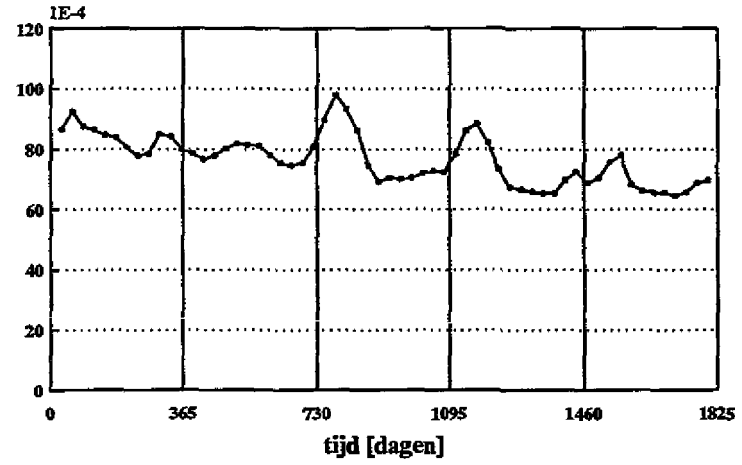
Figuur 12

BaP slibkwaliteit waterkolom
compartiment 4
[mg/kgOC]



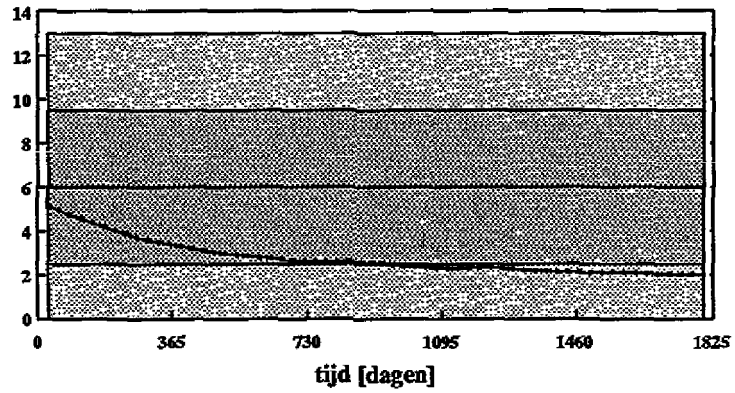
ijk14

BaP totaalconc. waterkolom
compartiment 4
[mg/l]



ijk14

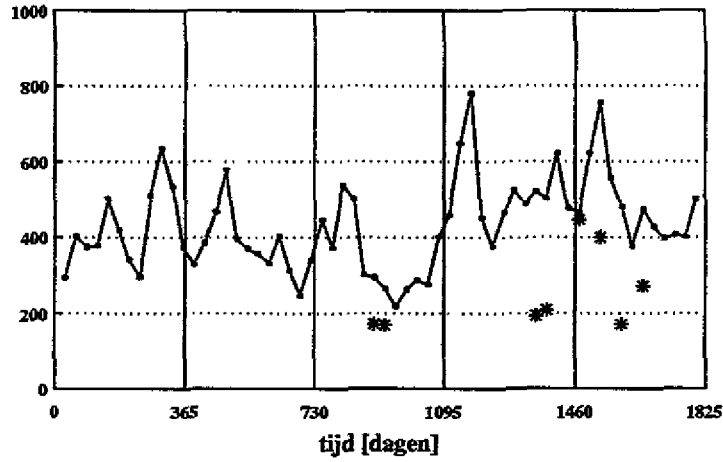
BaP slibkwaliteit waterbodem
compartiment 4
[mg/kgOC]



ijk14

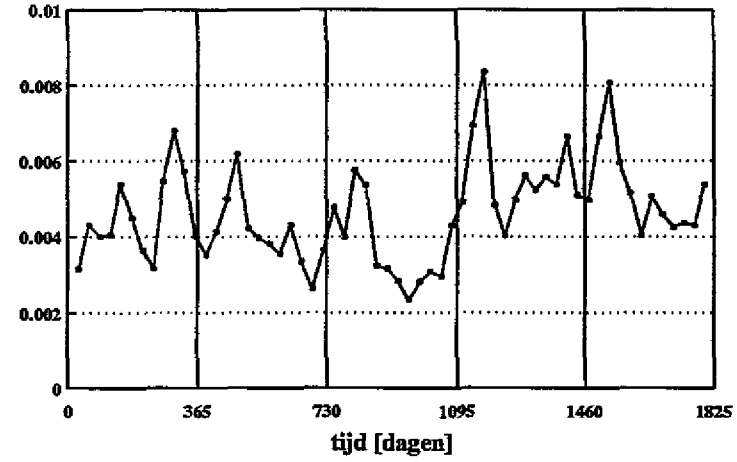
PCB52 slibkwaliteit waterkolom
compartment 1
[ug/kgOC]

Figuur 13



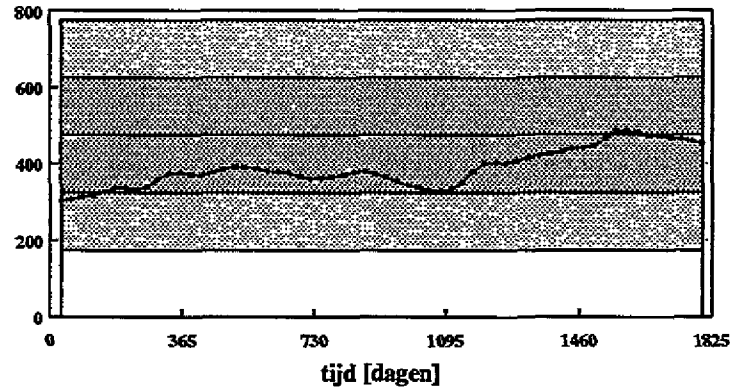
tjk14

PCB52 totaalconc. waterkolom
compartment 1
[ng/l]



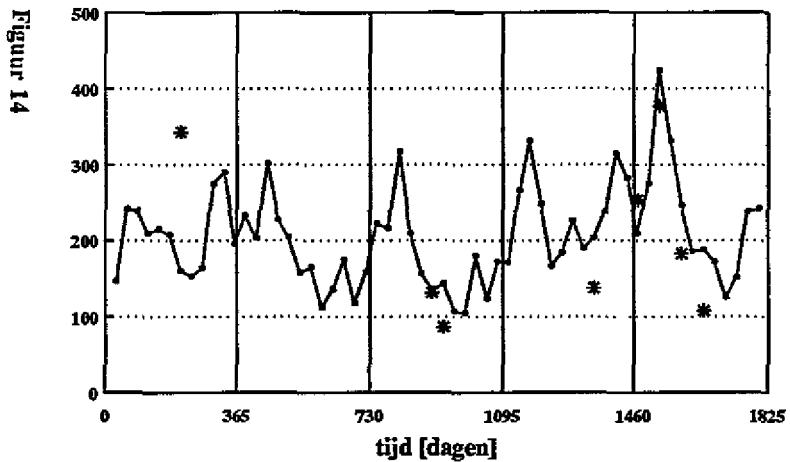
tjk14

PCB52 slibkwaliteit waterbodem
compartment 1
[ug/kgOC]



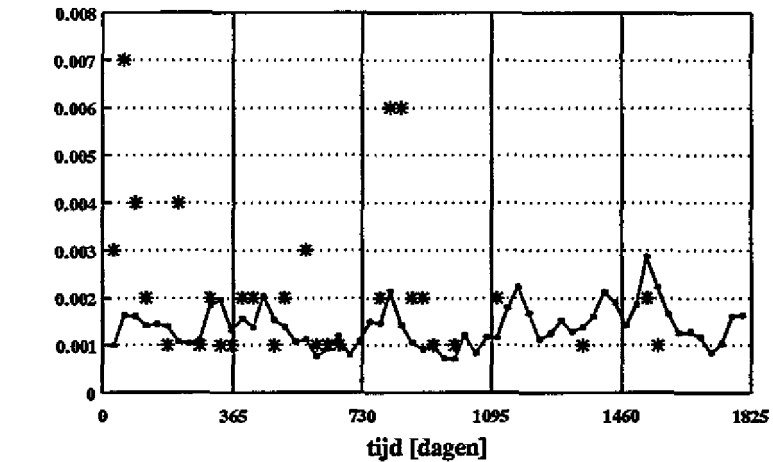
tjk14

PCB52 slibkwaliteit waterkolom
compartment 2
[ng/kgOC]



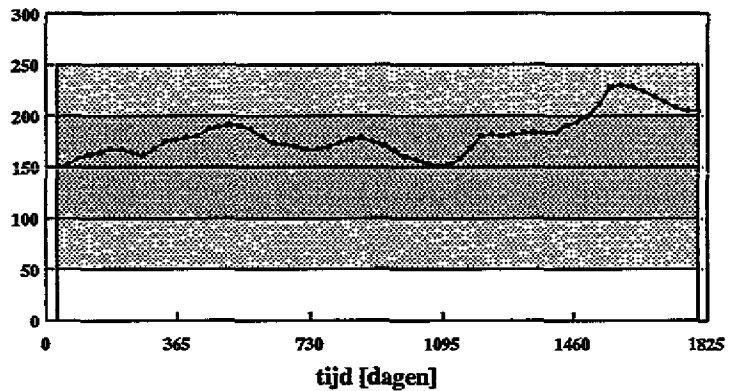
ijk14

PCB52 totaalconc. waterkolom
compartment 2
[ng/l]



ijk14

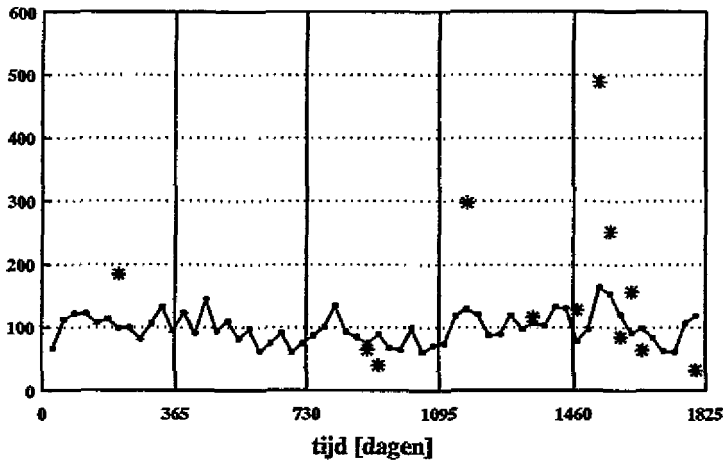
PCB52 slibkwaliteit waterbodem
compartment 2
[ng/kgOC]



ijk14

PCB52 slibkwaliteit waterkolom
compartiment 3
[ug/kgOC]

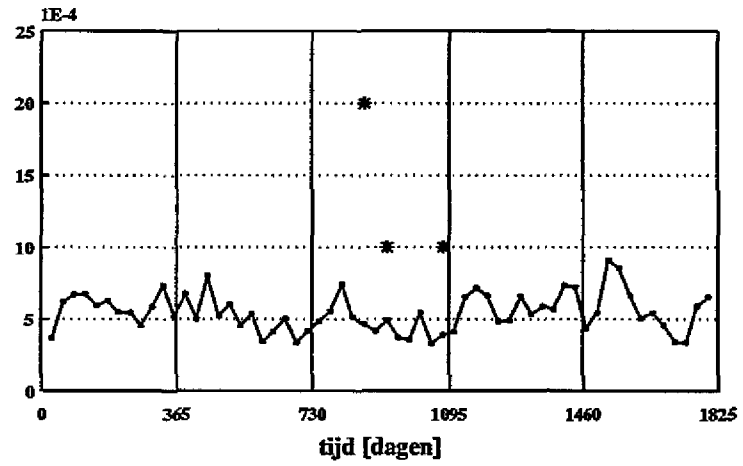
Figuur 15



ijk14

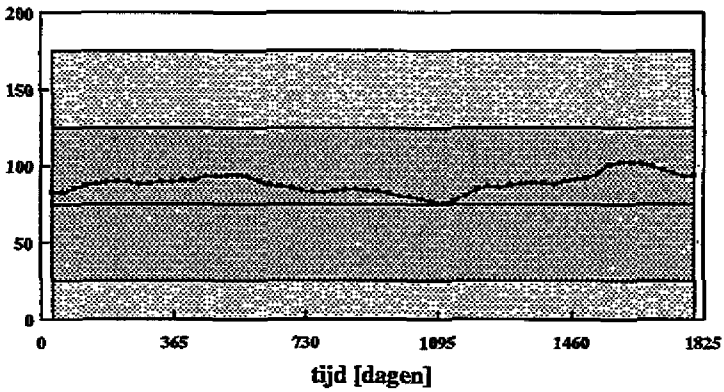
PCB52 totaalconc. waterkolom
compartiment 3
[ug/l]

ijk14

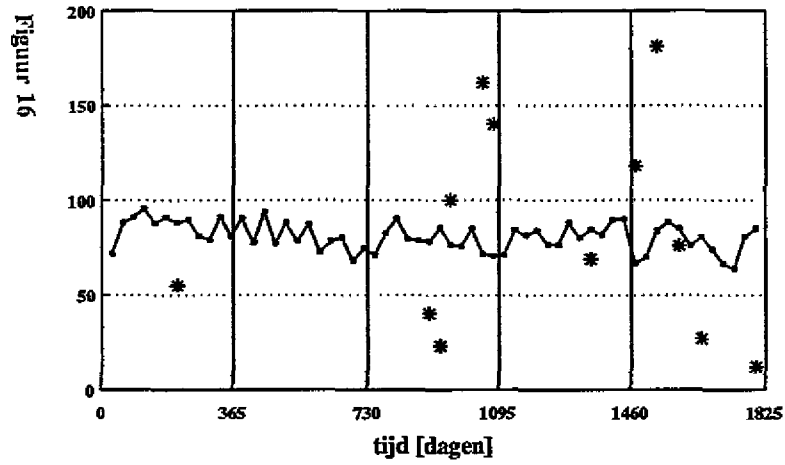


PCB52 slibkwaliteit waterbodem
compartiment 3
[ug/kgOC]

ijk14

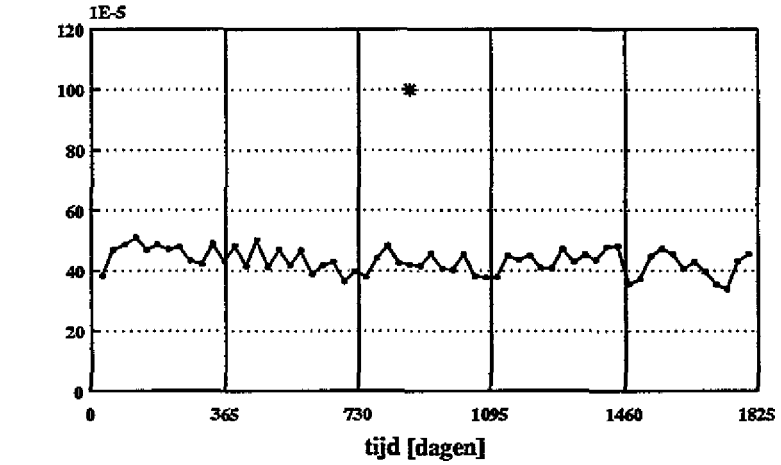


PCB52 slibkwaliteit waterkolom
compartment 4
[ug/kgOC]



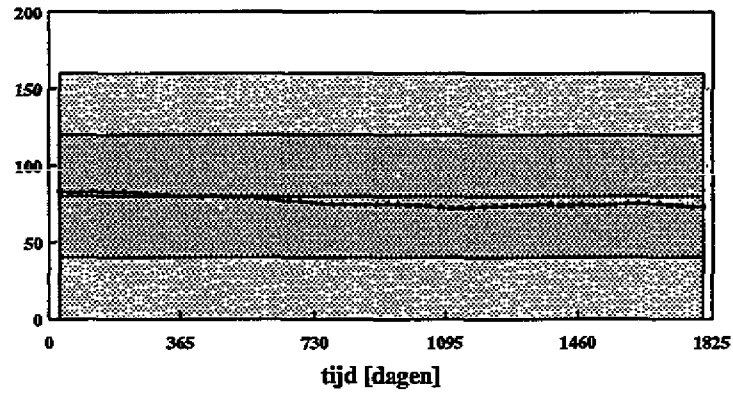
tjk14

PCB52 totaalconc. waterkolom
compartment 4
[ng/l]



tjk14

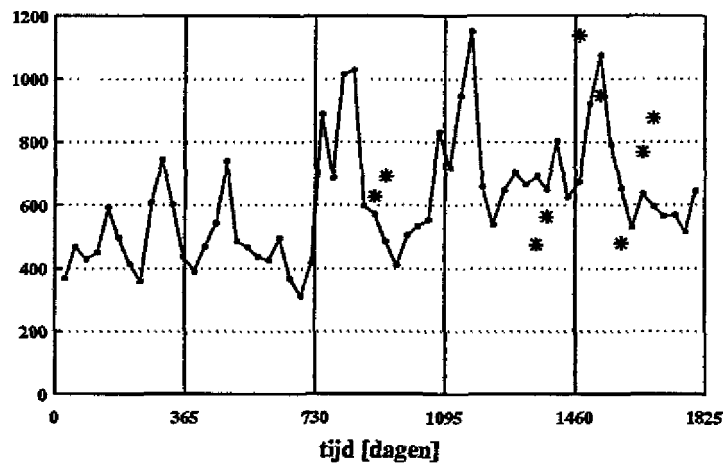
PCB52 slibkwaliteit waterbodem
compartment 4
[ug/kgOC]



tjk14

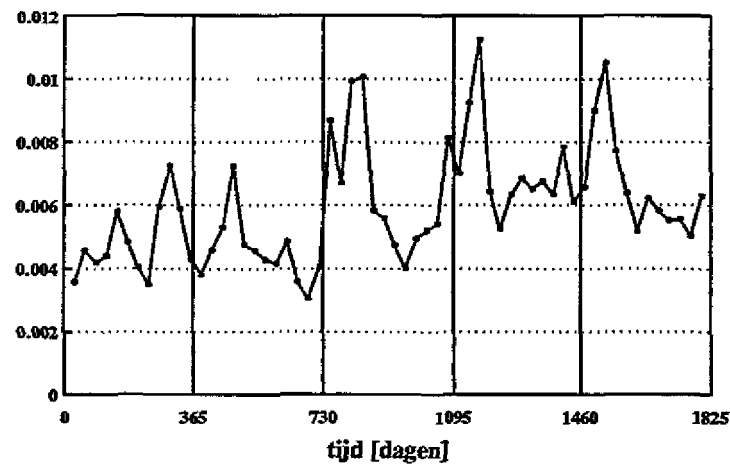
Figuur 17

PCB153 slibkwaliteit waterkolom
compartment 1
[ug/kgOC]



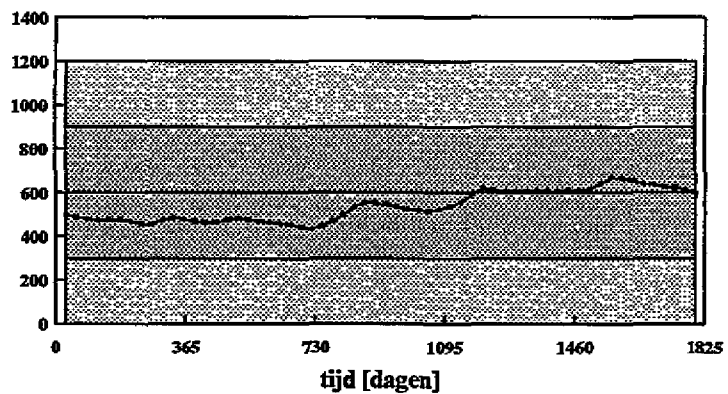
IJK14

PCB153 totaalconc. waterkolom
compartment 1
[ug/l]



IJK14

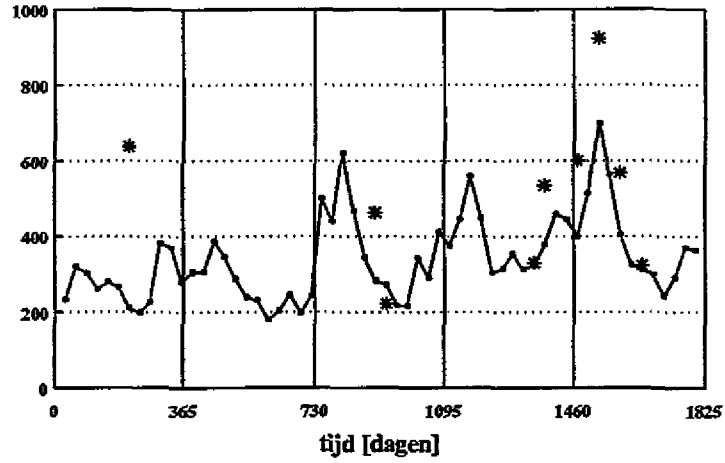
PCB153 slibkwaliteit waterbodem
compartment 1
[ng/kgOC]



IJK14

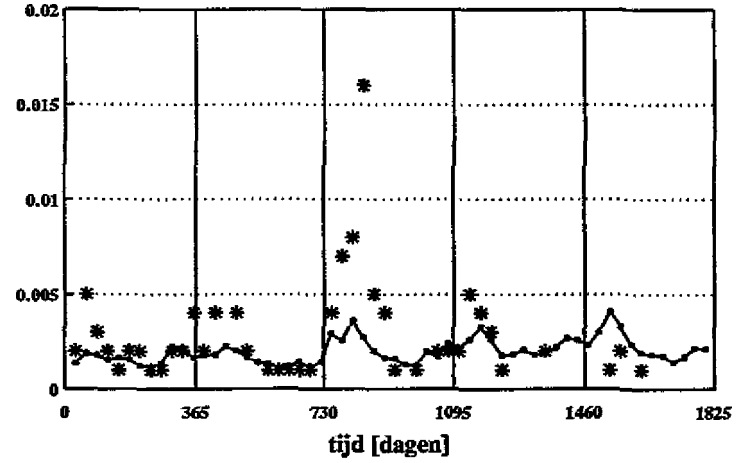
Figuur 18

PCB153 slibkwaliteit waterkolom
compartment 2
[ug/kgOC]



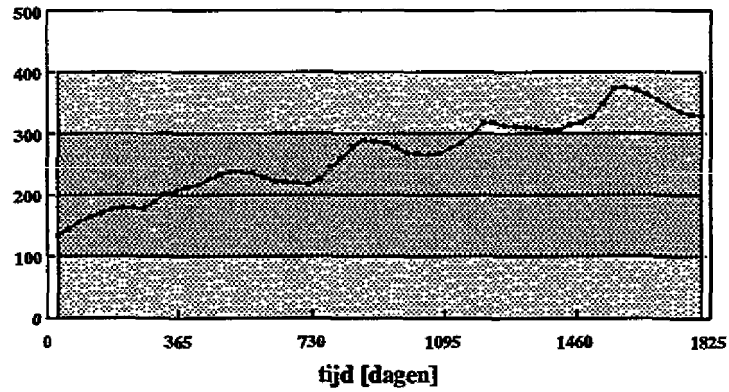
tjk14

PCB153 totaalconc. waterkolom
compartment 2
[ug/l]



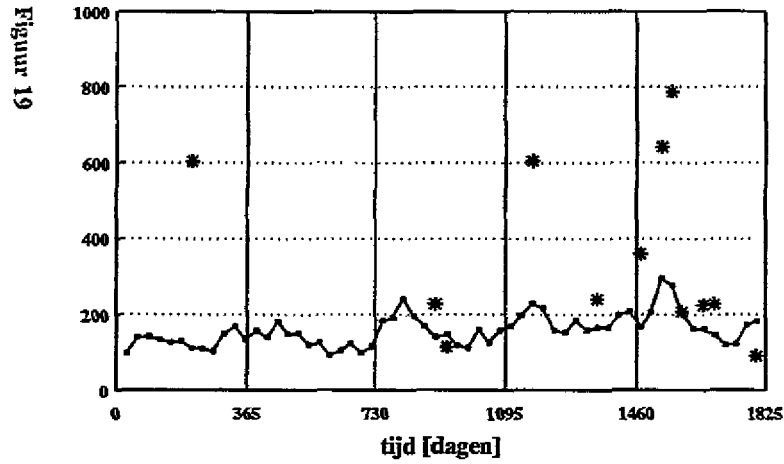
tjk14

PCB153 slibkwaliteit waterbodem
compartment 2
[ug/kgOC]



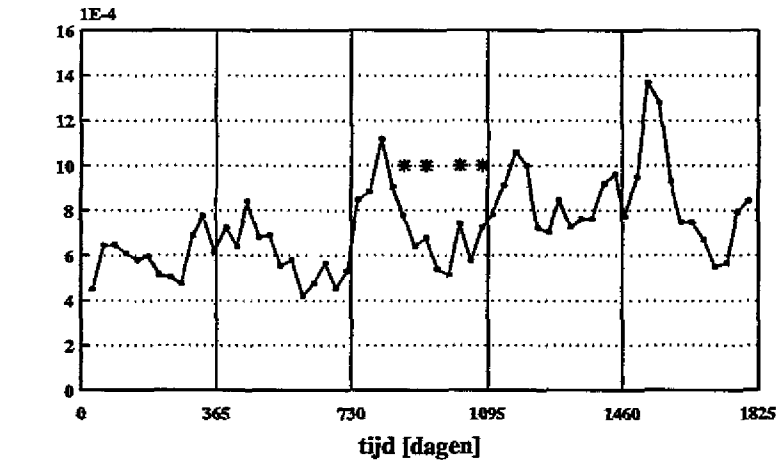
tjk14

PCB153 slibkwaliteit waterkolom
compartment 3
[µg/kgOC]



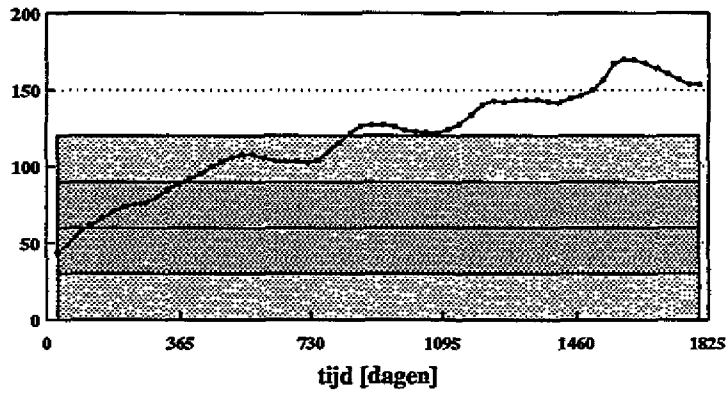
ijk14

PCB153 totaalconc. waterkolom
compartment 3
[µg/l]



ijk14

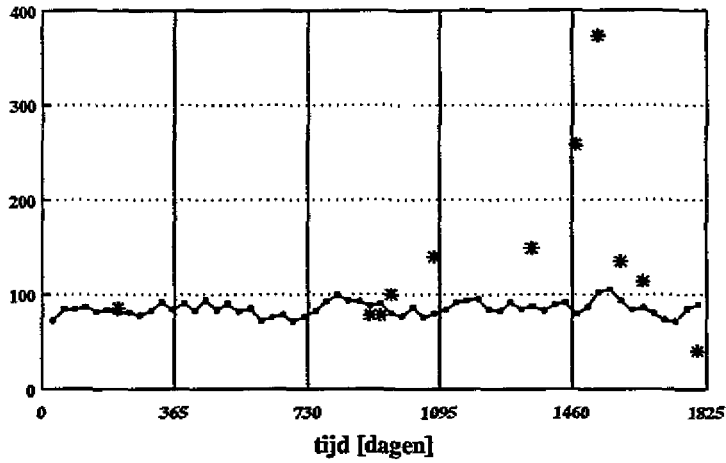
PCB153 slibkwaliteit waterbodem
compartment 3
[µg/kgOC]



ijk14

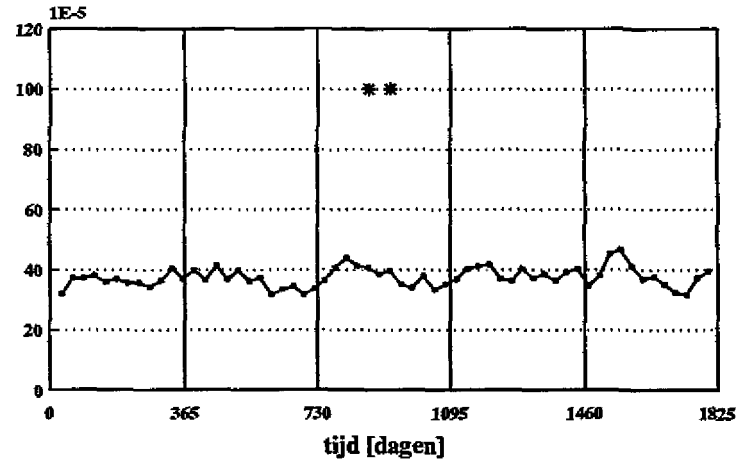
Figuur 20

PCB153 slibkwaliteit waterkolom
compartiment 4
[ug/kgOC]



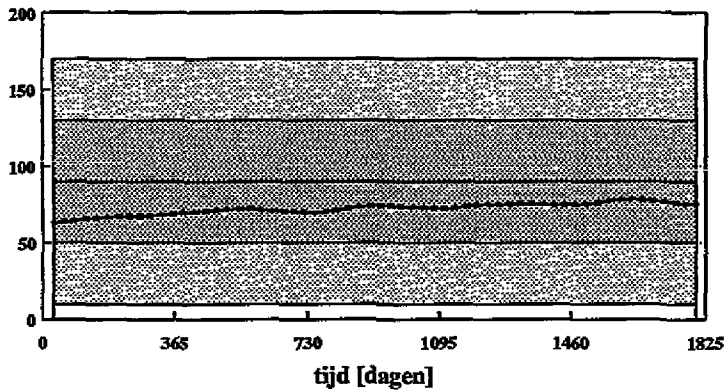
IJK14

PCB153 totaalconc. waterkolom
compartiment 4
[ug/l]



IJK14

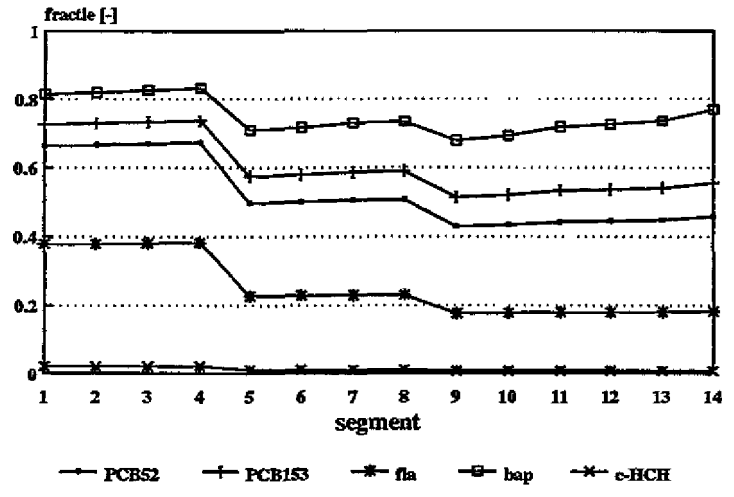
PCB153 slibkwaliteit waterbodem
compartiment 4
[ug/kgOC]



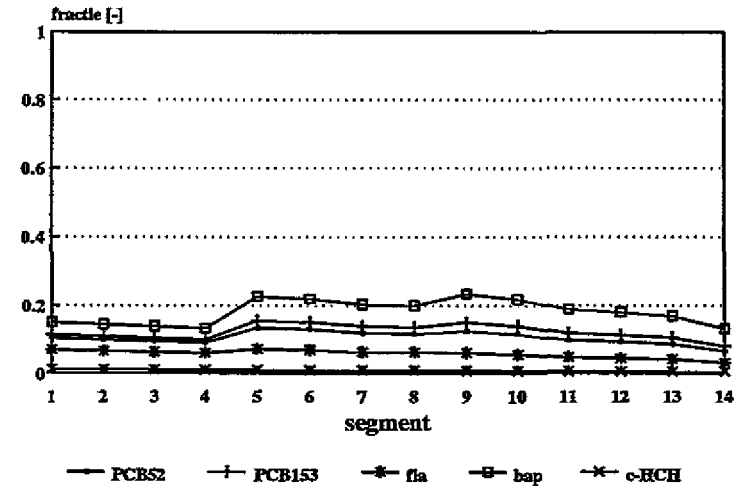
IJK14

Figuur 21

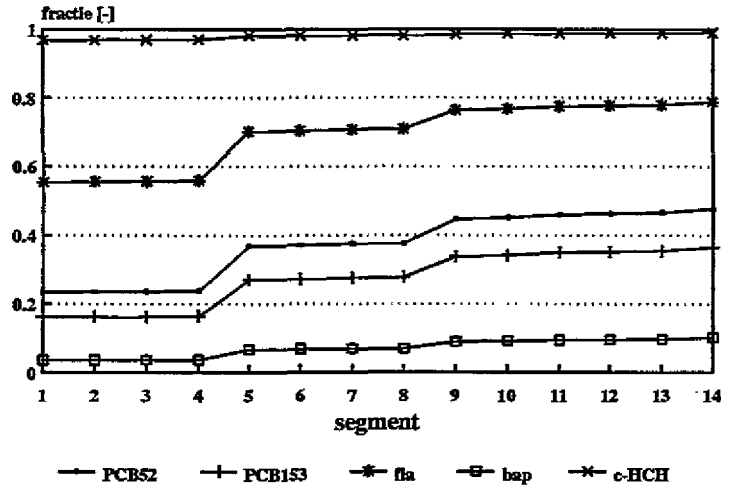
fractie geadsorbeerd



fractie DOC-gebonden



fractie vrij opgelost



Legenda

—*— meting

—■— berekening

gemiddelde + 2.st.dev.

gemiddelde + st.dev.

gemeten gemiddelde

gemiddelde - st.dev.

gemiddelde - 2.st.dev.

meetranges bodemgehaltes

