

waterloopkundig laboratorium  
delft hydraulics laboratory

waterkwaliteitsmodel Rijn

toepassing van het waterkwaliteitsmodel  
MODQUAL op de Rijn

verslag onderzoek

---

R 1056-VII/S 321-VI

juli 1981

BIBLIOTHEEK  
Waterloopkundig Laboratorium  
Postbus 177 - DELFT  
NEDERLAND

---

waterkwaliteitsmodel Rijn

toepassing van het waterkwaliteitsmodel  
MODQUAL op de Rijn

verslag onderzoek

---

R 1056-VII / S 321-VI

juli 1981

## Samenvatting

Het in deze studie ontwikkelde waterkwaliteitsmodel voor de Rijn, waarbij de modellering van de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding centraal heeft gestaan, kan worden beschouwd als een instrument waarmee de waterkwaliteit van de Rijn kan worden bestudeerd in relatie tot (1) de belasting met verontreinigende stoffen afkomstig van afvalwaterlozingen en diffuse bronnen, (2) hydrologische-, (3) thermische- en (4) seizoensmatige omstandigheden.

Het opgebouwde waterkwaliteitsmodel voor de Rijn omvat zowel procedures voor gegevensopslag, verwerkingsprogramma's en modellen, waarvan het waterkwaliteitsmodel MODQUAL een centrale plaats inneemt.

Uit de berekeningsresultaten op basis van zowel jaargemiddelde als maandgemiddelde omstandigheden over de periode 1972-1977, kan worden afgeleid dat het model in staat is de concentratieniveau's en trends in deze niveau's onder veranderde condities, vrij goed te voorspellen. Vanwege het belang van het model voor het aanleveren van de toekomstige randvoorwaarden, voor het IJsselmeer en de toekomstige zoete Delta-wateren, onder voorgenomen beleids- en beheersmaatregelen, zijn vooral de berekeningsresultaten voor Lobith, Kampen en Gorinchem nader beschouwd.

Beperkingen in de beschikbaarheid van gegevens enerzijds en de betreffende eenvoud (steady-state benadering) van het model anderzijds hebben tot gevolg dat het model momenteel ongeschikt is voor een gedetailleerde simulatie van het dynamisch gedrag van de waterkwaliteit.

Gelet op de onzekerheden in een aantal ter beschikking staande gegevens (o.a. emissiegegevens) is het, voor een verantwoorde toepassing van het model op langere termijn, van belang de modelaannamen en invoer van het model te evalueren in relatie tot nieuwe inzichten en nieuw ter beschikking staande gegevens.

Het huidige waterkwaliteitsmodel is mede daarom zo opgezet dat eventuele modificaties op eenvoudige wijze kunnen worden ingebracht.

## INHOUD

Samenvatting

Inhoudsopgave

Lijst van figuren

Lijst van tabellen

	blz.
<u>1</u> <u>Inleiding</u> .....	1
1.1    Het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn".....	1
1.2    Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Rijn.....	4
<u>2</u> <u>Modelkeuze</u> .....	6
2.1    Algemeen.....	6
2.2    Het waterkwaliteitsmodel MODQUAL.....	9
<u>3</u> <u>Opbouw van het Waterkwaliteitsmodel Rijn</u> .....	14
3.1    Algemeen.....	14
3.2    Rivierschematisatie in relatie tot hydrologische, emissie en immissie gegevens.....	16
3.3    Instromende debieten en bijbehorende achtergrond concentraties...	21
3.4    Emissie vanuit afvalwaterlozingen.....	24
3.5    Het gebruik van immissiegegevens.....	26
<u>4</u> <u>Beschouwde waterkwaliteitsprocessen</u> .....	27
4.1    Algemeen.....	27
4.2    Processen m.b.t. zuurstofhuishouding.....	27
4.3    Processen m.b.t. stikstofhuishouding.....	32
4.4    Processen m.b.t. fosfaathuishouding.....	35
4.5    Processen m.b.t. algen en detritus.....	36
<u>5</u> <u>Kalibratie, Verifikatie en Gevoeligheidsonderzoek</u> .....	39
5.1    Algemeen.....	39
5.2    Modelresultaten van de jaargemiddelde simulatie voor 1973 (kali- bratie).....	41

INHOUD (vervolg)

5.3	Modelresultaten van de jaargemiddelde simulatie voor 1977 (verifikatie).....	50
5.4	Modelresultaten van de maandgemiddelde simulatie van 1973 en 1977.....	54
5.5	Modelresultaten van de maandgemiddelde simulatie van 1972, 1973, 1974, 1976 en 1977.....	57
5.6	Modelsimulatie van het 'fliessende Welle' onderzoek 1974.....	59
5.7	Gevoeligheidsonderzoek.....	61
5.8	Invloed van middeling in de tijd.....	64
<u>6</u>	<u>Konklusies en Diskussie.....</u>	<u>67</u>

Literatuur

Figuren

Bijlagen:

I Projektorganisatie

II Konsekwenties van de steady-state aanname

## Lijst van figuren

- 1.1 Globaal overzicht van de gebieden in Nederland welke in enigerlei mate met Rijnwater worden gevoed
- 2.1 Integrale modelstructuur van MODQUAL
- 2.2 Rivierschematisatie door MODQUAL in trajecten en rekenelementen
- 2.3 Het basismodel MODQUAL in relatie tot het databestand en procedures voor kalibratie en verificatie
- 3.1 Modelopzet van het waterkwaliteitsmodel Rijn
- 3.2 Het gemodelleerde deel van het stroomgebied van de Rijn
- 3.3 Rivierschematisatie van het waterkwaliteitsmodel Rijn
- 4.1 Schematisering van de zuurstofhuishouding in MODQUAL
- 4.2 Zuurstofverbruik bij oxydatie van organisch koolstof en de betekenis van BOD<sub>5</sub>, BOD<sub>∞</sub> en COD
- 4.3 Invloed van zuivering op de afbraaksnelheid van BOD-C, [5]
- 4.4 Relatie van de afbraaksnelheid van BOD-C op basis van de verhouding COD/BOD<sub>5</sub>
- 4.5 Schematisering van de stikstofhuishouding in MODQUAL
- 4.6 Schematisering van de fosfaathuishouding in MODQUAL
- 4.7 Schematisering van de interacties m.b.t. algen en detritus in MODQUAL
- 5.1 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (debiet)
- 5.2 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (temperatuur)
- 5.3 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (zuurstof)
- 5.4 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (BOD<sub>5</sub>)
- 5.5 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (COD)
- 5.6 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (K<sub>j</sub>d-N)
- 5.7 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (NH<sub>4</sub>-N)
- 5.8 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (NO<sub>2</sub>-N)
- 5.9 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (NO<sub>3</sub>-N)
- 5.10 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (totaal-N)
- 5.11 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (ortho-P)
- 5.12 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (totaal-P)
- 5.13 Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973 (algen)
- 5.14 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (debiet)
- 5.15 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (temperatuur)
- 5.16 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (zuurstof)
- 5.17 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (BOD<sub>5</sub>)
- 5.18 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (COD)

Lijst van figuren (vervolg)

- 5.19 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (Kjd-N)
- 5.20 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 ( $\text{NH}_4\text{-N}$ )
- 5.21 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 ( $\text{NO}_3\text{-N}$ )
- 5.22 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (totaal-N)
- 5.23 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (ortho-P)
- 5.24 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (totaal-P)
- 5.25 Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (algen)
- 5.26 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (afvoer)
- 5.27 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (temperatuur)
- 5.28 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (zuurstof)
- 5.29 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith ( $\text{BOD}_5$ )
- 5.30 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (COD)
- 5.31 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (Kjd-N)
- 5.32 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith ( $\text{NH}_4\text{-N}$ )
- 5.33 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith ( $\text{NO}_3\text{-N}$ )
- 5.34 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (totaal-N)
- 5.35 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (ortho-P)
- 5.36 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (totaal-P)
- 5.37 Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (algen)
- 5.38 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Lobith (debiet, temperatuur)
- 5.39 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (zuurstof)
- 5.40 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen ( $\text{BOD}_5^{20}$ )
- 5.41 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (COD)
- 5.42 Maandgemiddelde simulatie 1972-1977 Lobith, Gorinchem, Kampen (Kjeldahl-stikstof)
- 5.43 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (ammonium)
- 5.44 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (nitraat)
- 5.45 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Lobith, Gorinchem, Kampen (totaal-stikstof)

Lijst van figuren (vervolg)

- 5.46 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (ortho-fosfaat)
- 5.47 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (totaal-fosfaat)
- 5.48 Maandgemiddelde simulaties 1972-1977 Lobith, Gorinchem, Kampen (algen)
- 5.49 Simulaties "fliessende Welle" 1974 (zuurstof)
- 5.50 Simulatie "fliessende Welle", 1974 ( $BOD_5^{20}$ )
- 5.51 Simulatie "fliessende Welle", 1974 (ammonium)
- 5.52 Simulatie "fliessende Welle", 1974 (nitraat)
- 5.53 Simulatie "fliessende Welle", 1974 (ortho-fosfaat)
- 5.54 Invloed van afvalwaterlozingen en processen op zuurstof, BOD, COD (jaargemiddelde 1977)
- 5.55 Invloed van afvalwaterlozingen en processen op Kj-d-N, ammonium en nitraat (jaargemiddelde 1977)
- 5.56 Invloed van afvalwaterlozingen en processen op totaal-N, ortho-P, totaal-P (jaargemiddelde 1977)
- 5.57 Invloed van algen op zuurstof, BOD, COD (Lobith, maandgemiddelde 1977)
- 5.58 Invloed van algen op Kj-d-stikstof, ammonium (Lobith, maandgemiddelde 1977)
- 5.59 Invloed van het afvoerregiem op zuurstof en BOD (jaargemiddelde 1977)
- 5.60 Invloed van het afvoerregiem op Kj-d-N en nitraat (jaargemiddelde 1977)
- 5.61 Invloed van het afvoerregiem op ortho-P en totaal-P (jaargemiddelde 1977)
- 5.62 Invloed van temperatuur op zuurstof en BOD (jaargemiddelde 1977)
- 5.63 Invloed van temperatuur op ammonium en nitraat (jaargemiddelde 1977)



Lijst van tabellen

	blz.
3.1 Gemodelleerde puntinstromingen en puntlozingen.....	20
3.2 Achtergrondconcentraties van het instromende water.....	23
3.3 Samenstelling en hoeveelheid afvalwaterproduktie per i.e.....	25
3.4 Zuiveringsreduktiefactoren.....	25
5.1 Gemeten en berekende waterkwaliteit te Lobith, Kampen, Vreeswijk en Gorinchem (jaargemiddelde 1973).....	48
5.2 Overzicht van de waarden van procesparameters zoals die zijn in- gesteld bij de kalibratie op het jaargemiddelde van 1973.....	49
5.3 Gemeten en berekende waterkwaliteit te Lobith, Kampen, Vreeswijk en Gorinchem (jaargemiddelde 1977).....	52
5.4 Overzicht gevoeligheidsonderzoek voor Lobith (jaargemiddelde 1977)	62
5.5 Berekeningsresultaten voor Lobith (jaargemiddelde 1973 en 1977) op basis van jaargemiddelde en maandgemiddelde invoergegevens.....	65

## 1 Inleiding

### 1.1 Het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn"

In 1976 is met betrekking tot een modelmatige benadering van de waterkwaliteit van de Rijn een samenwerkingsprojekt gestart tussen het Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater (RIZA), Directie Waterhuishouding en Waterbeweging (W&W), Rijksinstituut voor Drinkwatervoorziening (RID) en het Waterloopkundig Laboratorium (WL).

In de eerste probleemanalyserende fase is de waterkwaliteit van de Rijn beschouwd uit een oogpunt van beleid en beheer, waarbij relaties zijn gelegd tussen waterkwaliteitsaspecten en de schade, die een onvoldoende waterkwaliteit veroorzaakt bij de gebruikers van het Rijnwater. Tevens is het belang aangegeven van een modelmatige beschouwing van de waterkwaliteit opdat meer kwantitatieve informatie ter beschikking komt van beleid en beheer.

Op basis van de resultaten van de probleemanalyserende fase is in overleg met het RIZA, besloten tot modellering van de waterkwaliteit van de Rijn, waarbij de hoogste prioriteit dient te worden toegekend aan de nutriëntenhuishouding. Dit vooral vanwege de belangrijke relatie met de eutrofiëringsproblematiek in de min of meer stagnante wateren, die in hoofdzaak met het Rijnwater worden gevoed (b.v. het IJsselmeer en de toekomstige zoete Delta wateren).

Vanwege de onderlinge samenhang tussen de nutriënten- en zuurstofhuishouding, is deze laatste eveneens in beschouwing genomen mede omdat de voorgenomen saneringsmaatregelen in het stroomgebied van de Rijn zich vooralsnog vooral richten op een reducering van de lozing van zuurstofbehoevende stoffen. Met het onderzoek, dat in opdracht van het RIZA door het WL wordt uitgevoerd in samenwerking met het RIZA, W&W, RID en de Dienst Informatie Verwerking (DIV) van Rijkswaterstaat, wordt beoogd een mathematisch model te ontwikkelen dat in staat is de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding van de Rijn te beschrijven als functie van hydrologische gegevens, lozingsgegevens en temperatuur.

Benevens de mogelijkheid om met het model voorspellingen te kunnen doen met betrekking tot de na voltooiing van de geplande saneringsmaatregelen te verwachten zuurstof- en nutriënteniveaus te Lobith, Kampen, Vreeswijk en Gorinchem, mag worden verwacht dat het onderzoek het inzicht zal vergroten in de herkomst van belastingen op de Rijn en de invloed van processen.

Op deze wijze ontstaat tevens de mogelijkheid alternatieve c.q. additionele saneringsmaatregelen te formuleren, alsmede de effecten van deze maatregelen op de waterkwaliteit te kwantificeren.

Het projekt is in hoofdlijnen begeleid door een daartoe ingestelde stuurgroep "Waterkwaliteitsmodellering Rijn en Maas".

Voor de meer konkrete uitvoering van het onderzoek en de ontwikkeling van het model heeft regelmatig overleg plaatsgevonden binnen de daartoe ingestelde projektgroep "Waterkwaliteitsmodel Rijn".

De taak en samenstelling van zowel de stuurgroep als de projektgroep is opgenomen in Bijlage I.

In het kader van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn" zijn in de probleem-analyserende fase de navolgende rapporten verschenen.

- . R1056-I/S321-I  
"Modellering Rijnwaterkwaliteit, probleemanalyse",  
april 1977.
  
- . R1056-II/S321-II  
"Modellering Rijnwaterkwaliteit, processen zuurstofmodellering",  
april 1977.
  
- . R1056-III/S321-III  
"Modellering Rijnwaterkwaliteit, zuurstofmodellen",  
april 1977.

De rapportage van de 2e fase van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn" met betrekking tot de modellering van zuurstof en nutriënten omvat de navolgende rapporten:

- . CBH 79-518  
"Stikstofhuishouding in de Rijn en de Rijntakken",  
december 1979.
  
- . R1056-IV/R1463-I/S321-IV  
"MODQUAL, een ééndimensionaal steady state waterkwaliteitsmodel voor rivierstelsels",  
juli 1981.

- . R1056-V/S321-V  
"Diffuse bronnen, aard en omvang van de diffuse belasting met nutriënten in het stroomgebied van de Rijn,  
juli 1981.
  
- . R1056-VI  
"Data-rapport, gegevens verzameling en analyse ten behoeve van de modellering van de zuurstof- en nutriëntenhuishouding"  
juli 1981.
  
- . R1056-VII/S321-VI  
"Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Rijn"  
juli 1981.
  
- . R1056-VIII  
"Simulaties met het waterkwaliteitsmodel Rijn, zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding",  
augustus 1981.

Het rapport R1056-IV/R1463-I/S321-IV betreft een gezamenlijke rapportering van de projecten waterkwaliteitsmodellering Rijn en Maas.

Het onderhavige rapport R1056-VII/S321-VI "Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Rijn", wordt in paragraaf 1.2 nader ingeleid.

## 1.2 Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Rijn

Zoals in de projektbeschrijving (paragraaf 1.1) reeds is aangegeven wordt met het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn" voornamelijk beoogd de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding van de Rijn te beschrijven na voltooiing van de geplande saneringsmaatregelen. Vanwege de eutrofiëringsproblematiek in de min of meer stagnante wateren, die met Rijnwater worden gevoed, richt het projekt zich vooral op het voorspellen van de toekomstige nutriënten-niveaus. De ontwikkeling van de Rijnwaterkwaliteit is tevens een belangrijke randvoorwaarde voor de functies, die aan het Rijnwater kunnen worden toegekend, zodat de resultaten van dit projekt mogelijk van belang kunnen zijn voor de in de toekomst op te stellen waterkwaliteitsplannen. Tevens is het projekt van belang voor studies, waarbij de ontwikkeling van de kwaliteit van het Rijnwater een belangrijke randvoorwaarde is, zoals studies met betrekking tot sanering en inrichting van het IJsselmeer, de inrichting van het delta-gebied, en de waterhuishouding van Nederland (PAWN-studie).

In figuur 1.1 is aangegeven welk gedeelte van Nederland in meerdere of mindere mate door Rijnwater wordt beïnvloed.

Het zal duidelijk zijn dat de kwaliteit in de Nederlandse Rijntakken in belangrijke mate wordt bepaald door de kwaliteit van het Rijnwater zoals dat bij Lobith, Nederland binnenstroomt. Het waterkwaliteitsmodel dient derhalve benevens de Nederlandse Rijntakken tevens het bovenstrooms van Lobith gelegen stroomgebied van de Rijn te omvatten. Aangezien belangrijke saneringsmaatregelen zijn gepland in zowel Duitsland, Frankrijk als Zwitserland is uiteindelijk verkozen het gehele stroomgebied benedenstrooms van de Bodensee te modelleren. Als basis voor het waterkwaliteitsmodel Rijn is nagegaan in hoeverre gebruik zou kunnen worden gemaakt van een bestaand waterkwaliteitsmodel. Uiteindelijk is mede in het licht van de doelstelling van het projekt en de beschikbaarheid van gegevens gekozen voor een in de Verenigde Staten ontwikkeld ééndimensionaal steady state model dat bekend staat onder de naam QUAL-II. In het kader van de projekten Rijn en Maas is de procesbeschrijving van het model aangepast aan nieuwe inzichten en geschikt gemaakt voor toepassing op rivieren als de Rijn en Maas. Een beschrijving van het op diverse onderdelen gemodificeerde model, MODQUAL, is opgenomen in het rapport R1056-IV/R1463-IV/ S321-IV, "MODQUAL een ééndimensionaal steady state model voor rivierstelsels".

Het model, dat als basis is gebruikt voor het waterkwaliteitsmodel Rijn kan worden gerangschikt onder de categorie deterministische modellen, hetgeen impliceert dat de waterkwaliteit wordt berekend op basis van een mathematische

beschrijving van fysische, (bio)chemische en biologische processen. Een belangrijke basis voor de toepassing van een dergelijk model wordt gevormd door de invoergegevens. Dit betreft onder andere hydrologische gegevens, temperatuur en gegevens omtrent de emissie (lozingen) op het te modelleren stroomgebied van de Rijn. Tevens zijn gegevens noodzakelijk voor een toetsing van de berekende resultaten aan de gemeten waterkwaliteit (immissiegegevens). Boven genoemde gegevens zijn in het kader van het projekt verzameld en opgenomen in een databestand. Een beschrijving en analyse van de verzamelde meetgegevens is opgenomen in het rapport R1056-VI, "Datarapport, gegevens verzameling en analyse ten behoeve van de modellering van de zuurstof- en nutriëntenhuishouding". Vanwege de invloed van de belasting via diffuse bronnen is een uitgebreid literatuur onderzoek verricht voor de min of meer 'natuurlijke' of 'achtergrond' belasting op de Rijn. Dit onderzoek is afzonderlijk gerapporteerd in het rapport R1056-V/S321-V, "Diffuse bronnen, aard en omvang van de diffuse belasting met nutriënten in het stroomgebied van de Rijn".

Naast de hierboven genoemde gegevens voor invoer en toetsing van het waterkwaliteitsmodel dienen tevens de waarden voor een aantal procesparameters te worden bepaald. Hoewel een aantal van deze parameters op basis van literatuurgegevens bekend mag worden verondersteld zal de waarde van enkele procesparameters door middel van kalibratie dienen te worden bepaald. Dit kalibreren, (inregelen) van het model is noodzakelijk vanwege de invloed van specifieke omstandigheden, zoals bacterie-koncentraties, bodemgesteldheid, turbulentiegraad e.d., op de betreffende procesparameters. De bijstelling van de procesparameters, binnen de ranges zoals die in de literatuur voorkomen, is geschied op basis van een vergelijk van de berekende resultaten en de gemeten waterkwaliteitsgrootheden. Door toepassing van het gekalibreerde model op een andere tijdreeks kan worden nagegaan in hoeverre met het model voorspellingen mogelijk zijn (verifikatie).

In het onderhavige rapport wordt beschreven op welke wijze het basismodel MODQUAL is toegepast op de Rijn. Tevens wordt ingegaan op de wijze, waarop de kalibratie en verifikatie van het model is verricht en de konklusies, die uit de toetsing van het model kunnen worden afgeleid met betrekking tot het gebruik van het model voor voorspellingen onder een gewijzigde lozingssituatie. Het betreffende onderzoek is in nauw overleg met de projektgroep "Waterkwaliteitsmodel Rijn" (zie bijlage I) uitgevoerd en gerapporteerd door ir. J.A. van Pagee.

## 2 Modelkeuze

### 2.1 Algemeen

Reeds in een vroeg stadium van het projekt diende een keuze te worden gemaakt met betrekking tot het basiskoncept van het waterkwaliteitsmodel. Allereerst is hierbij een keuze gemaakt met betrekking tot het toepassen van een zogenaamd "black-box" model, danwel een deterministisch model.

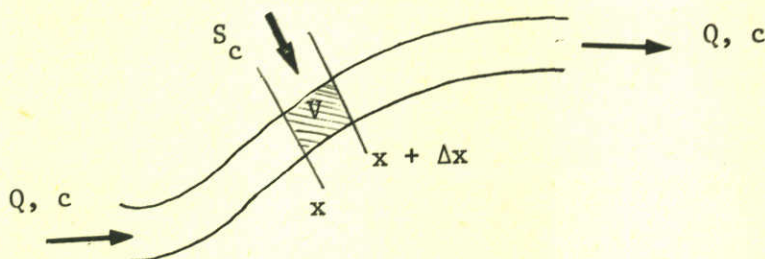
Een "black-box" model kan worden beschouwd als een over het algemeen eenvoudig model, waarin geen specifieke kennis van het systeem is vereist. De waterkwaliteitsgrootheden worden berekend op basis van eenvoudige functies, die met behulp van regressie-technieken uit historische tijdreeksen zijn afgeleid. Aangezien een dergelijk model geen fysische, chemische of biologische grondslag heeft, zullen de factoren, die de waterkwaliteit beïnvloeden en die niet in het regressiemodel zijn opgenomen, zich niet structureel mogen wijzigen.

Mede omdat in de doelstelling van het projekt is opgenomen, dat het model moet kunnen voorspellen bij een gewijzigde lozings situatie, terwijl tevens mag worden verwacht dat het model het inzicht in de herkomst van de belasting op de Rijn en de invloed van processen zal vergroten, is gekozen voor het principe van een deterministisch model. Een dergelijk model beschrijft de waterkwaliteit op basis van een mathematische formulering van fysische, (bio)chemische en biologische processen in de rivier en de belasting op de rivier. Een nadeel van een deterministisch model is, dat het vrij complex is, terwijl tevens voldoende kennis van het systeem noodzakelijk is voor een adequate beschrijving van de processen. De nauwkeurigheid waarmee een dergelijk model kan voorspellen, is afhankelijk van de natuurgetrouwheid waarmee bepaalde processen zijn beschreven, alsmede de nauwkeurigheid waarmee de procesparameters kunnen worden bepaald. Afhankelijk van de beschikbare gegevens zal over het algemeen een keuze moeten worden gemaakt met betrekking tot de mate van detail waarmee de processen kunnen worden gemodelleerd. Een uiterst gedetailleerd model kan niet toepasbaar blijken te zijn indien onvoldoende gegevens beschikbaar zijn voor de bepaling van de bijbehorende procesparameters.

Vanwege de beperkingen van het beschikbare gegevensbestand van de Rijn (zie rapport R1056-VI, Datarapport), is de toepassing van een volledig deterministisch model niet mogelijk.

Eén van de beperkingen is de beschouwing van de gemiddelde waterkwaliteit over de dwarsdoorsnede van de rivier (ééndimensionaliteit). De mathematische beschrijving van de waterkwaliteit in een dergelijk rivierstelsel is gebaseerd

op volume- en massa-balansen.



Massabalans over riviersegment  $x, x+\Delta x$

De massa-verandering in een riviersegment ( $x, x+\Delta x$ ) wordt bepaald door advektief transport, dispersief transport, door belasting als gevolg van lozingen en door processen (reacties) in de rivier. De mathematische beschrijving voor een riviersegment met volume  $V(m^3)$  luidt,

$$\begin{aligned}
 V \cdot \Delta c &= \{ (Q \cdot c)_x - (Q \cdot c)_{x+\Delta x} \} \cdot \Delta t \\
 &+ \{ ( - A_x D_L \frac{dc}{dx} )_x - ( - A_x D_L \frac{dc}{dx} )_{x+\Delta x} \} \cdot \Delta t \\
 &+ S_c \cdot \Delta t \quad + \text{reacties}
 \end{aligned}$$

Hierbij is  $\Delta c$  de concentratieverandering ( $g/m^3$ ) in het riviersegment voor de beschouwde tijdstap  $\Delta t$  (s),  $Q$  het debiet ( $m^3/s$ ),  $c$  de concentratie ( $g/m^3$ ),  $x$  de plaats (m) in de rivier,  $\Delta x$  de lengte van het segment (m),  $D_L$  de dispersiecoëfficiënt ( $m^2/s$ ) en  $S_c$  de lozingshoeveelheid ( $g/s$ ) over het riviersegment. Met de relaties;

$$V = A_x \cdot \Delta x \quad \text{en} \quad Q = v \cdot A_x$$

waarbij  $A_x$  het oppervlak van de dwarsdoorsnede is ( $m^2$ ) en  $v$  de stroomsnelheid (m/s), kan met de limietovergang voor  $\Delta x \rightarrow 0$  en  $\Delta t \rightarrow 0$ , uit de bovengenoemde massabalans de volgende partiële differentiaal vergelijking worden afgeleid;

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{1}{A_x} \frac{\partial(Qc)}{\partial x} + \frac{1}{A_x} \frac{\partial(A_x D_L \frac{\partial c}{\partial x})}{\partial x} + \frac{S_c}{A_x \Delta x} + \text{reacties} \quad (1)$$

(1)
(2)
(3)
(4)



Uit de vergelijking blijkt dat de lokale concentratieverandering een gevolg is van (1) advektief transport, (2) dispersief transport, (3) belasting door lozingen en (4) processen (reacties) in de rivier. Opgemerkt dient te worden dat het dispersief transport slechts gedeeltelijk wordt veroorzaakt door moleculaire bewegingen (moleculaire diffusie) en turbulente wervels (turbulente diffusie), maar vooral het gevolg is van snelheidsgradiënten en concentratiegradiënten over de dwarsdoorsnede, die als gevolg van de aanname van één-dimensionaliteit niet in het advektief transport worden beschouwd. Hoewel de invloed van het dispersief transport hierdoor vele malen groter is dan de invloed van zuiver diffusief transport, is voor de Rijn de invloed van het dispersief transport op het concentratieverloop over het algemeen verwaarloosbaar. Dit geldt echter niet voor een beschouwing van kalamiteuze lozingen en/of hoogwatergolven, waarbij de concentratie-verschillen vele malen groter zijn dan onder 'normale' omstandigheden.

De toepassing van het bovengenoemde modelconcept op de Rijn wordt bemoeilijkt door de beperkte beschikbaarheid aan gegevens. Dit betreft enerzijds het ontbreken van informatie omtrent het lozingsgedrag in de tijd, anderzijds is de frequentie waarmee de waterkwaliteit in het stroomgebied van de Rijn wordt bepaald zo laag\*), dat het waterkwaliteitsgedrag in de tijd onvoldoende bekend is voor een nauwkeurige toetsing van een op vergelijking (1) gebaseerd waterkwaliteitsmodel. Mede in het licht van de doelstelling van het projekt, waarbij is aangegeven dat de resultaten voornamelijk zullen worden gebruikt als randvoorwaarde voor de min of meer stagnante wateren, is gekozen voor een modelconcept dat zich voornamelijk richt op het berekenen van gemiddelde concentratieniveaus.

Dit impliceert dat de voorkeur is gegeven aan het gebruik van een 'steady state' model, waarbij is verondersteld dat zowel de debietverdeling als de belasting op het rivierstelsel tijdsafhankelijk is. De steady state aanname heeft tot gevolg dat vergelijking (1) overgaat in:

$$- \frac{1}{A_x} \frac{d(Qc)}{dx} + \frac{1}{A_x} \frac{d(A_x D_L \frac{dc}{dx})}{dx} + \frac{S_c}{A_x \Delta x} + \text{reacties} = 0 \quad (2)$$

---

\*) opgemerkt dient te worden dat na de ingebruikname van de monitorstations te Lobith, Kampen, Vreeswijk en Gorinchem deze bezwaren voor een aantal stoffen gedeeltelijk worden ondervangen.

zodat de lokale concentratie tijdsonafhankelijk is en wordt bepaald op basis van advektief-, en dispersief-transport, lozingen en reacties.

Het gevolg van de steady state aanname is dat het model alleen geschikt is voor simulaties van tijdsgemiddelden, waarbij de beschouwde periode groter is dan de looptijd van de rivier. Het model is ongeschikt voor toepassing onder kondities, waarbij grote tijdsafhankelijke variaties voorkomen in de factoren, die de waterkwaliteit beïnvloeden. Beperkingen gelden derhalve met betrekking tot debiet- en temperatuurvariatiën. In bijlage II is nader op deze beperkingen ingegaan, waarbij is gekonkludeerd dat de afwijkingen, die als gevolg van de steady state aanname worden veroorzaakt in de berekeningsresultaten acceptabel zijn, indien de debietvariatiën over de betreffende modelleringsperiode kleiner zijn dan ca. 30% van het gemiddelde. De toegestane temperatuurvariatie is ca. 5°C ten opzichte van het gemiddelde. Ten slotte kan worden opgemerkt dat toepassing van het steady state concept onder niet stationaire omstandigheden met de nodige voorzichtigheid dient plaats te vinden.

Ondanks de bovengenoemde beperkingen van een steady state model is omwille van de eenvoud en toepassingsmogelijkheden op de Rijn de voorkeur aan dit modelconcept gegeven. Vanwege de plaatsafhankelijkheid van de variabelen in vergelijking (2) en de veelal gekompliceerde beschrijving van de reaktietermen dient gebruik te worden gemaakt van numerieke oplostechieken.

Een keuze diende te worden gemaakt met betrekking tot het gebruik van een 'bestaand' model, danwel het ontwikkelen van een 'nieuw' model. Omwille van een snelle toepassing op de Rijn is hierbij de voorkeur gegeven aan een 'bestaand' model mits het model voldoende is uitgetest, eenvoudig kan worden gemodificeerd en toepasbaar is in het licht van de doelstelling van het project.

## 2.2 Het waterkwaliteitsmodel MODQUAL

In het kader van het project is nagegaan in hoeverre gebruik kan worden gemaakt van bestaande waterkwaliteitsmodellen voor rivieren. Hierbij is gebleken dat met name een in de Verenigde Staten ontwikkeld waterkwaliteitsmodel, QUAL-II, een goede basis zou kunnen zijn voor toepassing op een rivier als de Rijn. Dit model is in opdracht van de Environmental Protection Agency (EPA) ontwikkeld en toegepast. Naast mogelijkheden voor de modellering van temperatuur, conservatieve stoffen en stoffen met een 1e orde reaktiekinetiek, is het model

in het bijzonder geschikt voor de modellering van de zuurstof-, stikstof-, en fosfaathuishouding, mede in relatie tot de algendynamiek.

De kenmerken van het model en de in het kader van de waterkwaliteitsmodellen Rijn en Maas aangebrachte modificaties zijn uitvoerig beschreven in het rapport R1056-IV/R1463-I/S321-IV, "MODQUAL, een ééndimensionaal steady state model voor rivierstelsels". In deze paragraaf zal derhalve worden volstaan met een korte karakterisering van het gemodificeerde model MODQUAL.

Zoals reeds is vermeld, is het model, MODQUAL, in het bijzonder ontwikkeld voor de modellering van de zuurstof-, stikstof-, en fosfaathuishouding, die zowel afzonderlijk als integraal in combinatie met de modellering van algen kunnen worden beschouwd.

Bij de integrale beschouwing worden de volgende waterkwaliteitscomponenten gesimuleerd:

zuurstof ( $O_2$ )			
biochemisch zuurstofverbruik (BOD-C)	}	chemisch zuurstofverbruik (COD)	
niet biochemisch oxydeerbare stoffen			
organisch-stikstof (org-N)	}	Kjeldahl-N	} totaal-N
ammonium ( $NH_4-N$ )			
nitriet ( $NO_2-N$ )			
nitraat ( $NO_3-N$ )			
ortho-fosfaat (ortho-P)	}	totaal-P	
partikulair fosfaat (part-P)			
algen (Chl-a)			
detritus (equivalent Chl-a)			

Een overzicht van de onderlinge relaties tussen de waterkwaliteitscomponenten is weergegeven in figuur 2.1.

Door het model worden bij de integrale beschouwing van de nutriënten- en zuurstofhuishouding in relatie tot algen de volgende waterkwaliteitsprocessen beschouwd:

m.b.t. zuurstofhuishouding:

- zuurstofuitwisseling via het grensvlak lucht/water (a)
- zuurstofproductie (fotosynthese) en respiratie door algen (b)
- zuurstofverbruik bij afbraak van detritus (c)
- zuurstofverbruik door de bodem (d)
- zuurstofverbruik bij biochemische afbraak van organische koolstof (e)
- bezinking van biochemisch afbreekbare organische koolstof (f)
- bezinking van niet biochemisch oxydeerbare stoffen (g)
- zuurstofverbruik bij oxydatie van  $\text{NH}_4$  tot  $\text{NO}_2$  (1e trap nitrifikatie) (h)
- zuurstofverbruik bij oxydatie van  $\text{NO}_2$  tot  $\text{NO}_3$  (2e trap nitrifikatie) (i)

m.b.t. stikstofhuishouding

- bezinking van organisch en partikulair stikstof (j)
- ammonifikatie van organisch stikstof (k)
- vrijkomen van  $\text{NH}_4$  uit het sediment (l)
- oxydatie van  $\text{NH}_4$  tot  $\text{NO}_2$  (1e trap nitrifikatie) (m)
- oxydatie van  $\text{NO}_2$  tot  $\text{NO}_3$  (2e trap nitrifikatie) (n)
- denitrifikatie van  $\text{NO}_3$  (o)
- vrijkomen van  $\text{NH}_4$  bij afbraak van detritus (p)
- opname van  $\text{NH}_4$ , danwel  $\text{NO}_3$  door algen (q)

m.b.t. fosfaathuishouding

- bezinking van organisch + partikulair fosfaat (r)
- mineralisatie en desorptie van organisch + partikulair P (s)
- adsorptie van en coagulatie ortho-P (t)
- vrijkomen van ortho-P uit het sediment (u)
- vrijkomen van ortho-P bij afbraak van detritus (v)
- opname van ortho-P door algen (w)

m.b.t. algendynamiek

- groei en respiratie van algen (b,q,w)
- afsterving van algen (x)
- bezinking van algen (y)
- bezinking van detritus (z)

Een groot aantal processen in het model zijn temperatuurafhankelijk, zoals de zuurstofuitwisseling met de atmosfeer, de afbraak van detritus en organisch koolstof, het bodemzuurstofverbruik, de ammonifikatie, de nitrifikatie en de

denitrifikatie, alsmede de groei, respiratie en afsterving van algen.

De zuurstofproduktie en de opname van nutriënten door algen is gekoppeld aan de algengroei, die afhankelijk is van zoninstraling (daglichtlengte), het lichtklimaat in het water (extinktie), de gemiddelde diepte en de nutriënten-koncentraties indien deze limiterend zijn.

Opgemerkt dient te worden dat enkele gemodelleerde stoffen niet rechtstreeks kunnen worden vergeleken met gemeten waterkwaliteitsgrootheden. Dit betreft het biochemisch zuurstofverbruik, het chemisch zuurstofverbruik, het organisch gebonden stikstof en het organisch gebonden fosfaat. Aan deze gemodelleerde waterkwaliteitskomponenten dient namelijk het aandeel van algen en detritus te worden toegevoegd.

Naast de bovengenoemde waterkwaliteitskomponenten van de zuurstof-, stikstof-, en fosfaat-huishouding, algen en detritus, biedt het model mogelijkheden voor de modellering van temperatuur, conservatieve stoffen en stoffen met een lage afbraak. Op eenvoudige wijze kan het model tevens worden aangepast voor de modellering van stoffen met een willekeurige reaktiekinetiek.

Numeriek gezien wordt de massabalans-vergelijking (2) impliciet opgelost op basis van een eindige differentie methode. Hierbij is de rivier beschouwd als te zijn opgebouwd uit een aaneenschakeling van rekenelementen. Binnen een rekenelement wordt de waterkwaliteit als homogeen verondersteld. De lengte van de rekenelementen is voor het gehele rivierstelsel gelijk. Onderscheid wordt gemaakt in een aantal typen rekenelementen, waardoor het onder andere mogelijk is riviertakken te laten samenkomen of afsplitsen, alsmede lozingen en onttrekkingen in het model aan te geven. De gezamenlijke emissie van kleine lozingen kan homogeen verdeeld over een traject worden ingebracht, waarbij een traject is opgebouwd uit een geheel aantal rekenelementen. Binnen een traject zijn bepaalde eigenschappen van het rivierstelsel gelijk. Dit geldt met name voor de procesparameters, de hydraulische relaties en andere randvoorwaarden. In figuur 2.2 is schematisch de opbouw van een traject aangegeven, waarbij voor een rekenelement tevens de in- en uitgaande termen van de massabalans-vergelijking zijn opgenomen.

De invoergegevens voor het model kunnen worden onderscheiden in 4 kategoriën te weten:

### 1. rivierschematisatie en hydrologische gegevens

Dit betreft onder andere de schematisatie van het te modelleren rivierstelsel in rekenelementen en trajekten. Voor ieder rekenelement dient te worden opgegeven of dit element een lozing vertegenwoordigt, en knooppunt is van twee trajekten, een bovenstroomse of benedenstroomse begrenzing van het model is, danwel een element dat zich bovenstrooms van een stuw bevindt.

Voor ieder traject dienen de hydraulische specificaties te worden ingevoerd ten behoeve van de berekening van de gemiddelde diepte en stroomsnelheid.

Verder is informatie noodzakelijk omtrent instromende debieten en de debietverdeling bij splitsingen.

### 2. lozingen e.d.

Dit betreft de waterkwaliteit van het instromende water (belasting door diffuse bronnen), de belasting door afvalwaterlozingen, die als puntlozing in het model zijn beschouwd, alsmede de belasting door afvalwaterlozingen waarvan de emissie homogeen over het betreffende traject is verdeeld.

### 3. procesparameters

Dit betreft zowel het aangeven van de optie waarmee bepaalde procesparameters door het model worden berekend, als een directe invoer van bepaalde procesparameters per traject.

### 4. randvoorwaarden e.d.

Indien de temperatuur of algen niet worden gemodelleerd kunnen de gemeten temperaturen en algenconcentraties als randvoorwaarden worden gebruikt. Op deze wijze kunnen temperatuureffekten en de invloed van algengroei- en respiratie in beschouwing worden genomen, zonder het daadwerkelijk modelleren van respektievelijk de temperatuur of algen.

Naast bovengenoemde invoergegevens zijn voor de toetsing van de modelresultaten tevens de in het rivierstelsel gemeten waterkwaliteitsvariabelen (immisatie-gegevens) van belang. Deze toetsing vormt een belangrijke basis voor de kalibratie en verifikatie van het model.

In figuur 2.3 is de relatie van het basismodel MODQUAL met het databestand en het onderzoek met betrekking tot kalibratie en verifikatie nader aangegeven.

### 3 Opbouw van het waterkwaliteitsmodel Rijn

#### 3.1 Algemeen

De opbouw van het waterkwaliteitsmodel voor de Rijn beperkt zich niet tot het toepassen van het basismodel MODQUAL, maar omvat in feite de algehele organisatie van gegevensbestanden, voorberekingsprogramma's, sturingsprogramma's en programma's voor de verwerking van de resultaten. De activiteiten die nodig zijn voor de opbouw zijn onder te verdelen in een 8-tal kategoriën, dit betreft:

1. de schematisatie van de rivier in relatie tot hydrologische, emissie en immissie-gegevens
2. het bepalen van de debietverdeling in het rivierstelsel
3. het bepalen van de achtergrond concentraties van het instromende water
4. het bepalen van de emissie van afvalwaterlozingen
5. het bepalen van de procesparameters op basis van literatuurgegevens
6. het vergelijken van de berekeningsresultaten met de gemeten waterkwaliteit (immissie-gegevens)
7. het kalibreren (bijstellen) van de procesparameters en achtergrondconcentraties (diffuse bronnen)
8. het verifiëren van het model

In dit hoofdstuk zal vooral aandacht worden besteed aan de activiteiten 1 t/m 4 en 6. De mathematische beschrijving van waterkwaliteitsprocessen en procesparameters (5) zal in hoofdstuk 4 worden beschouwd, terwijl in hoofdstuk 5 de kalibratie (7) en verifikatie (8) wordt toegelicht.

Nauw gerelateerd aan bovengenoemde activiteiten is de opbouw van gegevensbestanden en voorberekingsprogrammatuur. Deze activiteit is afzonderlijk gerapporteerd in het rapport R1056-VI, "Datarapport, gegevensverzameling en analyse ten behoeve van de modellering van de zuurstof- en nutriëntenhuishouding". In dat rapport is reeds aangegeven op welke wijze de oorspronkelijke gegevens met betrekking tot hydrologie, emissie en immissie worden voorberekt tot invoer van het basismodel MODQUAL, danwel worden gebruikt als toetsingsgrootheden voor de berekeningsresultaten.

Een overzicht van de datafiles, verwerkingsprogrammatuur, sturingsprogrammatuur e.d., in relatie tot het basismodel MODQUAL is opgenomen in figuur 3.1. Het invoerbestand voor het waterkwaliteitsmodel MODQUAL is opgesplitst in 5 delen te weten:

- INFILE 21 invoerbestand voor de sturing van het model met inbegrip van de rivierschematisatie en enkele proceskonstanten voor het gehele rivierstelsel
  
- INFILE 22 invoerbestand voor de hydraulische karakteristieken en de procesparameters per modeltraject
  
- INFILE 24 invoerbestand voor de temperatuur en de startwaarden voor algenconcentraties en daglichtlengte
  
- INFILE 25 invoerbestand voor de instromende debieten en de bijbehorende achtergrondconcentraties op basis van de emissiebijdrage van diffuse bronnen
  
- INFILE 26 invoerbestand voor de emissiebijdrage van de afvalwaterlozingen (huishoudelijk, industrieel)

Het invoerbestand INFILE 25 wordt gegenereerd door het voorberekingsprogramma DIFCON, dat de achtergrondconcentraties toekent aan het instromende water. Een eventuele bijstelling van de waterkwaliteit van de bovenstroomse begrenzing van het waterkwaliteitsmodel is mogelijk op basis van het immissie-bestand. De instromende debieten worden berekend door het model AFVOER op basis van de gemeten debieten te Lobith, Kaub en Basel en de gemeten debieten van een 12-tal zijrivieren.

Het invoerbestand INFILE 26 wordt gegenereerd door het voorberekingsprogramma EMIS, dat de emissie door afvalwaterlozingen berekend uit de lozingsinventarisaties van de Internationale Rijncommissie (IRC).

De temperaturen in het immissie-bestand dienen als basis voor het invoerbestand INFILE 24.

Met het sturingsprogramma WMRIJN is het mogelijk de invoerbestanden zodanig te manipuleren dat op een eenvoudige wijze meerdere berekeningen met het basismodel MODQUAL kunnen worden uitgevoerd. Bij de semi-dynamische berekeningen (b.v. maandgemiddelden) voor een te simuleren jaar dienen per tijdsinterval de



bijbehorende invoerbestanden voor INFILE 24 en INFILE 25 te worden aangeroepen. De resultaten van deze berekeningen kunnen per lokatie worden samengevoegd en opgeslagen in afzonderlijke datafiles (WMRIJN PLOTFILE). Het sturingsprogramma is tevens bijzonder geschikt voor toepassingen in kalibratieprocedures en gevoeligheidsanalyses.

Het statistisch programmapakket SAS en het verwerkingsprogramma IMMIS worden gebruikt voor data-manipulaties met betrekking tot de gemeten concentraties. De uitvoer van deze programma's is geschikt voor het maken van computerplots met het programma PLOT, waarbij de berekende waterkwaliteit kan worden vergeleken met de gemeten concentraties.

### 3.2 Rivierschematisatie in relatie tot hydrologische, emissie en immissie gegevens

Zoals reeds in de inleiding is aangegeven is de opbouw van het waterkwaliteitsmodel Rijn zoveel mogelijk afgestemd op het doel waarvoor het model is ontwikkeld. Dit betreft het, onder aan te nemen condities voor temperatuur en afvoer, voorspellen van de zuurstof- en nutriënten niveaus, als randvoorwaarde voor de semi-stagnante wateren die met Rijnwater worden gevoed. Bij deze voorspellingen dient rekening gehouden te worden met wijzigingen in de lozingssituatie, die een gevolg kunnen zijn van de bouw van zuiveringsinstallaties, veranderingen in de afvalwaterproductie per lozingseenheid, toepassing van defosfatering, vervanging van polyfosfaten in wasmiddelen, toepassing van denitrifikatie, enz.

In verband met de voorspellende waarde van het model is het van belang dat voor de invoergegevens van het model geen gebruik wordt gemaakt van gemeten waterkwaliteitsgegevens van bovenstroomse begrenzingen of zijrivieren, indien als gevolg van veranderde omstandigheden de betreffende waterkwaliteit structureel kan veranderen.

Aangezien het belangrijkste deel van de belasting op de Rijn bovenstrooms van Lobith plaatsvindt en saneringsmaatregelen in zowel Nederland, Duitsland, Frankrijk en Zwitserland zijn gepland, is gekozen voor een modellering vanaf Stein (ca. 30 km benedenstrooms van de Bodensee). Hierbij is er vanuit gegaan dat, als gevolg van de bufferwerking van de Bodensee en de geringe bovenstroomse belasting, de waterkwaliteit ter plaatse van deze bovenstroomse begrenzing van het waterkwaliteitsmodel zich niet structureel zal wijzigen. Voor de zijrivieren op de Rijn is behalve voor de Neckar, Main en Moezel verondersteld dat de verblijftijd in deze zijrivieren zo kort is dat de invloed

van processen (afbraak, bezinking e.d.) verwaarloosbaar is. Voor deze betrekkelijk kleine zijrivieren, waarvan de grotere lozingen zich over het algemeen op een afstand van minder dan 50 km van de monding van de Rijn bevinden, is derhalve voor de afvalwaterlozingen op de zijrivier verondersteld, dat deze ter plaatse van de monding van de zijrivier in de Rijn zijn gekoncentreerd. Voor de zijrivieren Neckar, Main en Moezel is vanwege de grotere verblijftijd in deze rivieren en de grotere invloed op de waterkwaliteit van de Rijn, gekozen voor een opname van deze rivieren in het te modelleren rivierstelsel. In figuur 3.2 is aangegeven welk deel van het rivierstelsel is gemodelleerd. Dit betreft:

de Rijn	van Stein (30 km) tot Pannerdense kop (870 km)
de Neckar	over een traject van 180 km tot uitmonding in de Rijn
de Main	over een traject van 400 km tot uitmonding in de Rijn
de Moezel	over een traject van 300 km tot uitmonding in de Rijn
het Pannerdenskanaal	van Pannerdense kop (870 km) tot IJsselkop (880 km)
de IJssel	van IJsselkop (880 km) tot Kampen (1000 km)
de Nederrijn/Lek	van IJsselkop (880 km) tot Vreeswijk (950 km)
de Waal	van Pannerdense kop (870 km) tot Gorinchem (950 km)

Op basis van het toelaatbare onderscheidingsvermogen wat betreft de waterkwaliteitsberekening, de mogelijkheden voor het aangeven van puntlozingen, zijrivieren, splitsingen e.d. is gekozen voor een lengte van 10 km voor het kleinste rekenelement in MODQUAL. Vervolgens is op basis van de hydraulische gegevens met betrekking tot diepte, stroomsnelheid en instromende debieten, het rivierstelsel ingedeeld in modeltrajekten waarbij de lengten van deze trajekten zodanig zijn gekozen dat deze een geheel aantal rekenelementen omvatten. Tevens is bij de indeling van de modeltrajekten rekening gehouden met de eigenschap dat binnen een traject de belasting van kleine lozingen gelijkmatig over het traject kan worden verdeeld, alsmede de temperatuur en procesparameters uniform zijn.

In het model MODQUAL kunnen de hydraulische gegevens van een modeltraject zowel worden ingevoerd op basis van een geschematiseerde dwarsdoorsnede, verhang en ruwheidscoëfficiënt, als op basis van eenvoudige relaties voor de gemiddelde diepte en stroomsnelheid als functie van het debiet.

Aangezien deze laatste vorm de meest direkte wijze van invoer is, is hieraan de voorkeur gegeven. De betreffende relaties zijn:

$$\bar{v} = a Q^b \quad \text{en} \quad \bar{H} = c Q^d$$

a, b, c en d zijn konstanten, die karakteristiek zijn voor een bepaald traject. De stroomsnelheid  $\bar{v}$ , de diepte  $\bar{H}$  en het debiet  $Q$  worden voor ieder rekenelement binnen een traject afzonderlijk berekend. Het ligt voor de hand dat een andere hydraulische relatie, en derhalve een ander modeltraject, moet worden gekozen bij belangrijke veranderingen in het debiet (instromende zijrivier), de diepte en/of de stroomsnelheid. Uiteindelijk is voor het Rijn-traject Bodensee-Pannerdense kop een onderverdeling gemaakt in 14 modeltrajekten. Tesamen met de trajekten van de Neckar, Main en Moezel, alsmede het Pannerdenskanaal, de Waal, Nederrijn/Lek en IJssel, zijn voor het gehele waterkwaliteitsmodel Rijn 27 trajekten onderscheiden. Een overzicht van de rivierschematisatie op basis van modeltrajekten is opgenomen in figuur 3.3.

Wat betreft de debietverdeling in het rivierstelsel is bij de rivierschematisatie onderscheid gemaakt in puntinstromingen en diffuse instromingen. De puntinstromingen vertegenwoordigen het instromend debiet ter plaatse van de bovenstroomse begrenzings van de gemodelleerde riviertakken, alsmede die zijrivieren, waarvan het debiet een significante bijdrage levert aan het debiet in de betreffende riviertak. De in het model onderscheiden puntinstromingen zijn met pijlen aangegeven in de rivierschematisatie (figuur 3.3).

De diffuse instroming betreft de toestroming vanuit kleine zijrivieren en beken, alsmede eventuele directe instroming via runoff en grondwatertoestroming, op de gemodelleerde riviertakken. Aangezien de invloed van deze instromingen slechts merkbaar is door hun gezamenlijk (kumulatief) effect zijn deze instromingen homogeen over de trajekten verdeeld.

De belasting op het gemodelleerde rivierstelsel kan worden onderscheiden in 3 kategoriën, te weten:

1. instroming van stoffen als gevolg van de concentratie in het instromende water ter plaatse van de bovenstroomse begrenzing van de gemodelleerde riviertakken (Rijn, Neckar, Main en Moezel)
2. instroming van stoffen als gevolg van de "natuurlijke" c.q. achtergrond concentratie van het instromende water
3. belasting als gevolg van afvalwaterlozingen (huishoudelijk en industrieel)

Aangezien de belasting vanuit de kategoriën 1 en 2 gebaseerd is op de concentraties van het instromende water, is de vracht (g/s), die vanuit deze katego-

riën wordt aangeleverd, sterk afhankelijk van het bijbehorende debiet. Het debiet van de afvalwaterlozingen is over het algemeen verwaarloosbaar ten opzichte van het debiet in het gemodelleerde rivierstelsel. De belasting vanuit de categorie 3 is derhalve gebaseerd op debietonafhankelijke vrachten (g/s).

De concentraties van het instromende water worden toegekend op basis van de in het kader van het projekt uitgevoerde studie naar de bijdrage van diffuse bronnen aan de nutriëntenbelasting (rapport R1056-V/S321-V)

De belasting vanuit de afvalwaterlozingen is bepaald op basis van de inventarisatie van de IRC met betrekking tot puntlozingen (zie verder het rapport R1056-VI, Datarapport (hoofdstuk 4)). Vanwege het grote aantal geïnventariseerde puntlozingen op het rivierstelsel (ca. 450), is onderscheid gemaakt in grote en kleine lozingen. Uit een nadere analyse van de lozingsinventarisaties is gebleken dat 13 grote lozers ( $> 10^6$  i.e.) en 9 grote zijrivieren ( $> 10^6$  i.e.) ongeveer driekwart van de totale afvalwaterproduktie vertegenwoordigen. Aangezien de invloed van de emissie van de resterende "kleine" lozers ( $< 10^6$  i.e.) slechts merkbaar is door hun gezamenlijke (kumulatief) effect, is de emissie van deze afvalwaterlozingen homogeen over de bijbehorende modeltrajekten verdeeld.

In verband met de bovengenoemde puntinstromingen en puntlozingen, die als zodanig in het model worden onderscheiden, zijn in het totaal 22 rekenelementen hiervoor gereserveerd. In tabel 3.1 is een overzicht van deze 22 puntinstromingen en puntlozingen opgenomen.

Samenvattend kan worden gesteld, dat de modelschematisatie van de Rijn is gebaseerd op de volgende modelkarakteristieken.

- lengte rekenelement	10 km
- aantal rekenelementen	200
- aantal trajekten	27
- aantal bovenstroomse begrenzingen	4
- aantal samenstromingen van gemodelleerde rivieren	3
- aantal splitsingen	2
- aantal puntinstromingen en puntlozingen	22

nr.	plaats	km	instroming	afvalwaterlozing
1	Rijn	60	Thur	Thur (rivier)
2	Rijn	100	Aare	Aare (rivier)
3	Rijn	200	-	Rhone Poulenc (chemisch)
4	Rijn	300	Ill	Cellulose Str. (celstof) / Strass- bourg (stedelijk) / Ill (rivier)
5	Rijn	360	-	Holzmann (papier)
6	Neckar	-100	Kocher + Jagst	Jagst (rivier)
7	Rijn	430	-	BASF (chemisch) / Waldhof (papier)
8	Rijn	470	-	Schwarzbach (rivier)
9	Main	-200	Wern + Saale	-
10	Main	- 40	Kinzig	Hoechst (chemisch) / Frankfurt (stedelijk)
11	Rijn	530	Nahe	-
12	Rijn	580	Lahn	-
13	Rijn	660	Sieg	-
14	Rijn	690	-	Köln (stedelijk)
15	Rijn	700	Wupper	Wupper (rivier) / Bayer, Leverk. (chemisch)
16	Rijn	710	-	Bayer, Dorm. (chemisch)
17	Rijn	730	-	Dusseldorf (stedelijk)
18	Rijn	750	-	Dusseldorf (stedelijk)
19	Rijn	760	-	Krefeld (stedelijk) / Bayer, Kref. (chemisch)
20	Rijn	780	Ruhr	Ruhr (rivier)
21	Rijn	790	-	Emscher (rivier)
22	Rijn	810	Lippe	Lippe (rivier)

Tabel 3.1 Gemodelleerde puntinstromingen en puntlozingen

### 3.3 Instromende debieten en bijbehorende achtergrondconcentraties

Eén van de basisonderdelen voor de toepassing van een waterkwaliteitsmodel is het bepalen van de debietverdeling in het gemodelleerde rivierstelsel. Aangezien het modelconcept gebaseerd is op de modellering van steady-state situaties ligt het voor de hand eerst een volumebalans op te stellen voor de te modelleren periode. Gebleken is dat over het algemeen geen nauwkeurige volumebalans kan worden opgesteld door enerzijds oneigenlijke verschillen tussen enkele afvoermeetstations, door anderzijds looptijdeffekten als gevolg van het niet steady-state gedrag van de rivier. Derhalve is volstaan met een eenvoudige bepaling van de debietverdeling op basis van de gemeten debieten te Lobith (865 km), Kaub (546 km) en Basel (167 km) en de gemeten debieten van de in het model opgenomen zijrivieren. De 'gemeten' debieten zijn gebaseerd op dagelijkse waarnemingen, waarvan de maandgemiddelden zijn opgenomen in het bestand AFVOER-DATA (zie fig. 3.1). Uit de volumebalans is voor de trajekten van de Rijn de totale diffuse instroming bepaald. De verdeling van de diffuse instroming per traject is gebaseerd op de grootte van het bijbehorende afstromingsoppervlak. Deze berekening van de instromende debieten kan worden gedaan met het voorbewerkingsprogramma AFVOER. Dit programma selekteert en berekent voor een te simuleren periode de instromende debieten en vergelijkt de bijbehorende volumebalans met de gemeten debieten van een 20-tal afvoermeetstations in de Rijn.

Met het programma DIFCON kunnen deze toestromingsgegevens zodanig worden bewerkt dat deze geschikt zijn voor invoer in het waterkwaliteitsmodel MODQUAL. Dit impliceert een verdeling van de toestromingen over de in het model onderscheidde instromingspunten en trajekten. Tevens kan via de sturingsinput van het programma een achtergrondkwaliteit aan het toestromende water worden toegekend. Deze concentraties zijn afgeleid uit de studie naar de invloed van diffuse bronnen (rapport R1056-V/S321-V). Voor een aantal stoffen bestaat de mogelijkheid om rekening te houden met eventuele seizoenvariaties, die zijn gebaseerd op een cosinus-vormige verandering van de concentratie over het jaar.

Door het programma wordt een data-file aangemaakt, die direkt geschikt is als onderdeel (INFILE 25) van het invoerbestand van MODQUAL (zie fig. 3.1).

Tevens geeft het programma voor iedere simulatieperiode (b.v. per maand) de achtergrondconcentraties te Lobith, onder de aanname dat geen omzettingen e.d. door processen plaatsvinden. Hoewel deze achtergrond concentraties geen reële

betekenis hebben, kan op deze wijze een indicatie worden verkregen omtrent het te verwachten aandeel van de belastingsbijdrage vanuit diffuse bronnen.

Op basis van het rapport R1056-V/S321-V, Diffuse bronnen, alsmede op basis van de gemeten waterkwaliteit (immissie-gegevens) van een aantal zijrivieren, zijn de achtergrondconcentraties aan het instromende water toegekend, zoals vermeld in tabel 3.2. Bij het toekennen van deze achtergrondconcentraties is onderscheid gemaakt tussen (1) toestroming vanuit de Bodensee, (2) instroming vanuit Zwitserland, (3) instroming vanuit Frankrijk en Duitsland en (4) instroming vanuit het stroomgebied van de Moezel.

Voor zuurstof en ammonium is een cosinus-vormige seizoensvariatie aangenomen en voor algen een (1-cosinus)-vormige seizoensvariatie.

De bijdrage van algen en detritus in BOD<sub>5</sub>, COD, org-N en part-P is gebaseerd op de in hoofdstuk 4 aangegeven proceskonstanten, die zijn afgeleid uit literatuurgegevens.

waterkwaliteitsvariabele	vanuit Bodensee	vanuit stroomgebied Zwitserland	vanuit stroomgebied Duitsland en Frankrijk	vanuit stroomgebied Moezel
O <sub>2</sub>	11 (1)	11 (1)	5 (1)	5 (1)
BOD <sub>5</sub> (excl. algen+det.)	-	-	-	-
BOD <sub>5</sub> (incl. algen+det.)	2,6 (0,6) <sup>-</sup>	2,6 (0,6) <sup>-</sup>	2,9 (0,9) <sup>-</sup>	2,9 (0,9) <sup>-</sup>
COD (excl. algen+det.)	3,0	2,0	2,0	2,0
COD (incl. algen+det.)	10,0 (3,0) <sup>-</sup>	10,0 (3,0) <sup>-</sup>	10,0 (4,5) <sup>-</sup>	10,0 (4,5) <sup>-</sup>
org-N (excl. algen+det.)	0,2	0,2	0,5	0,5
org-N (incl. algen+det.)	0,68 (0,18) <sup>-</sup>	0,68 (0,18) <sup>-</sup>	1,07 (0,27) <sup>-</sup>	1,07 (0,27) <sup>-</sup>
NH <sub>4</sub> <sup>-</sup> N	0,1 (0,1)	0,1 (0,1)	0,2 (0,2)	0,2 (0,2)
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> N	0,5	1,0	3,0	4,0
ortho-P	0,05	0,05	0,10	0,10
part-P (excl. algen+det.)	0,00	0,05	0,15	0,15
part-P (incl. algen+det.)	0,06 (0,02) <sup>-</sup>	0,11 (0,02) <sup>-</sup>	0,22 (0,03) <sup>-</sup>	0,22 (0,03) <sup>-</sup>
algen (Chl-a)	30 (30) <sup>-</sup>	30 (30) <sup>-</sup>	45 (45) <sup>-</sup>	45 (45) <sup>-</sup>
detritus (Chl-a)	50	50	50	50

( ) cosinus-vormige seizoensvariatie

( )<sup>-</sup> (1-cosinus)-vormige seizoensvariatie

Tabel 3.2 Achtergrondconcentraties (g/m<sup>3</sup>) van het instromende water



### 3.4 Emissie vanuit afvalwaterlozingen

Het aandeel van de belasting door afvalwaterlozingen wordt op basis van vrachten (g/s) berekend met het model EMIS. Dit model berekent uit de gegevens van de lozingsinventarisaties van de Internationale Rijncommissie (IRC) de netto belasting voor de gemodelleerde stoffen op basis van de hoeveelheid afvalwaterproduktie (aantal i.e.'s), de aard van de lozing (huishoudelijk, industrieel) en de aard van de zuivering (mechanisch, biologisch). Vervolgens vindt een sommatie per modeltrajekt plaats voor de lozingen, die niet als puntbelasting in het model zijn opgenomen. Indien gewenst, bevat de uitvoer van het model informatie over de belasting van iedere geïnventariseerde puntbron voor de verschillende gemodelleerde stoffen. Tevens is in de uitvoer opgenomen de totale belasting in het gemodelleerde deel van het stroomgebied van de Rijn. Het model maakt verder een data-file aan, die direkt geschikt is als onderdeel (INFILE 26) voor het invoerbestand van MODQUAL (zie fig. 3.1). Deze file bevat zowel de belasting per trajekt, per bovenstroomse begrenzing, als per puntbelasting.

De besturing van het model EMIS geschiedt door het toekennen van belastingshoeveelheden per i.e. per dag waarbij onderscheid kan worden gemaakt op basis van de herkomst van de belasting tussen huishoudelijk of industrieel. De mogelijkheid bestaat om de belasting voor een 14-tal industrieën te specificeren. Tevens kan voor de lozingen bovenstrooms van Lobith een andere belastingshoeveelheid per i.e. worden opgegeven.

De invloed van zuivering kan worden onderscheiden voor een 4-tal typen van zuivering. Voor de invloed van de zuivering op de stikstofcomponenten is rekening gehouden met de eventuele omzetting van org-N in  $\text{NH}_4\text{-N}$  en tenslotte in  $\text{NO}_3\text{-N}$ .

Op basis van het onderzoek zoals is gerapporteerd in het rapport R1056-VI (Data-rapport, hoofdstuk 4), zijn de in tabel 3.3 opgenomen belastinghoeveelheden per i.e. gebruikt.

Voor de berekening van de netto-belasting is rekening gehouden met de invloed van afvalwaterzuivering op basis van de in tabel 3.4 opgenomen zuiveringsreduktiefactoren.

afvalwaterproduktie (g/dag) per i.e.				
stof	huishoudelijk	chemisch	papier/celstof	overige industrieën
BOD <sub>5</sub>	60 <sup>1)</sup> 54 <sup>2)</sup>	60 <sup>1)</sup> 54 <sup>1)</sup>	60 <sup>1)</sup> 54 <sup>2)</sup>	60 <sup>1)</sup> 54 <sup>2)</sup>
COD	120	150	150/300	100-300 <sup>3)</sup>
org-N	6	6	4	6
NH <sub>4</sub> -N	7	6	0	6
NO <sub>3</sub> -N	0	1	0	0/1 4)
ortho-P	2,5 <sup>1)</sup> 2,0 <sup>2)</sup>	0,5	0	0,5
org+part-P	1,5 <sup>1)</sup> 1,4 <sup>2)</sup>	0,5	0,5	0,5

- 1) niet Nederlandse lozingen
- 2) Nederlandse lozingen
- 3) afhankelijk van de industrie-tak
- 4) metaalverwerkende industrieën

Tabel 3.3 Samenstelling en hoeveelheid afvalwaterproduktie per i.e

aard van zuivering				
stof	geen zuivering	mechanisch	part. biologisch	vol biologisch
BOD <sub>5</sub>	1,0	0,75	0,25	0,10
COD	1,0	0,75	0,45	0,20
org-N	1,0	0,75	0,30	0,15
NH <sub>4</sub> -N	1,0	0,90	0,85	0,15
NO <sub>3</sub> -N	1,0	0,90	0,80	0,70
ortho-P	1,0	0,95	0,90	0,85/0,10 <sup>*)</sup>
org+part	1,0	0,75	0,70	0,60/0,10 <sup>*)</sup>

\*) bij defosfatering

Tabel 3.4 Zuiveringsreduktiefactoren

### 3.5 Het gebruik van immissie-gegevens

Met uitzondering van de temperatuur worden de gemeten waterkwaliteitsgrootheden (immissie-gegevens) voornamelijk gebruikt voor een toetsing van de berekeningsresultaten van het waterkwaliteitsmodel. In het hoofdstuk 3 van het Data-rapport (rapport R1056-V) is aandacht besteed aan de beperkingen van de meetresultaten als gevolg van verschillen in analyse-methode, meetfrequentie, e.d. Aangezien het analyse-pakket van de meetstations van de Internationale Rijncommissie (IRC) het meest volledig is en het nauwst aansluit bij de te modelleren waterkwaliteitsvariabelen, zijn de modelresultaten voornamelijk getoetst aan deze gegevens.

De overige gegevens, die in het kader van de Arbeitsgemeinschaft der Länder zur Reinhaltung des Rheins (Arge Rhein) en de Internationale Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke im Rheineinzugsgebiet (IAWR) zijn verzameld, zijn bij de kalibratie en verificatie van het model eveneens ter illustratie opgenomen. Met het programmapakket SAS (Statistical Analysis System) en het programma IMMIS kunnen de waterkwaliteitsgegevens worden verwerkt van het Nederlandse meetnet van de Rijkswateren, opgeslagen in het WAKWAL-bestand en het opgebouwde bestand met waterkwaliteitsgegevens van de bovenstrooms van Lobith gelegen meetstations.

Deze verwerking betreft voor ieder meetstation het selekteren, middelen en berekenen van het 95% betrouwbaarheidsinterval voor de te modelleren periode. Met de programma's kunnen data-files worden aangemaakt die geschikt zijn als invoer in het plotprogramma (PLOT). Met het plotprogramma kunnen de berekeningsresultaten van MODQUAL en de door SAS of IMMIS verwerkte meetgegevens worden geplot op een zgn. CALCOMP-plotter en/of in de vorm van 'werkplots' op een lijnprinter. De relaties van de programma's SAS, IMMIS en PLOT met de data-files van het waterkwaliteitsmodel Rijn zijn geïllustreerd in figuur 3.1.

## 4 Beschouwde waterkwaliteitsprocessen

### 4.1 Algemeen

De waterkwaliteitsprocessen die in het waterkwaliteitsmodel Rijn zijn onderscheiden hebben veelal direkt betrekking op de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding. Vanwege een mogelijke invloed van algen in de zomerperiode zijn de processen met betrekking tot de algendynamiek eveneens in beschouwing genomen.

Aangezien in het rapport R1056-IV/R1463-I/S321-IV reeds uitvoerig is ingegaan op de beschrijving van de waterkwaliteitsprocessen in het model MODQUAL, zal in dit hoofdstuk worden volstaan met een korte samenvatting. Tevens zal aandacht worden besteed aan enkele aanpassingen van het model teneinde de toepassingsmogelijkheid in het kader van het waterkwaliteitsmodel Rijn te vergroten. Zoals in de inleiding reeds is opgemerkt is hierbij speciale aandacht besteed aan een formulering van de waterkwaliteitsprocessen zodanig dat de door middel van kalibratie in te stellen procesparameters zoveel mogelijk onafhankelijk zijn van veranderingen in externe omstandigheden waaronder hydrologie, temperatuur en belasting aan verontreinigende stoffen.

In de volgende paragrafen 4.2 t/m 4.5 zal worden ingegaan op respektievelijk de modellering van zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding, algen en detritus, waarbij in het bijzonder aandacht zal worden besteed aan procesconstanten en procesparameters. In iedere paragraaf wordt een overzicht gegeven van procesconstanten zoals die vanuit de literatuur bekend zijn en die niet door kalibratie op het rivierstelsel behoeven te worden bijgesteld, alsmede procesparameters die binnen de ranges van de literatuur worden aangepast aan de specifieke omstandigheden in de Rijn en de zijrivieren.

### 4.2 Processen met betrekking tot zuurstofhuishouding

De zuurstofhuishouding omvat als toestandsvariabelen het zuurstofgehalte ( $O_2$ ) en het potentiële zuurstofverbruik dat nodig is voor de mineralisatie van organisch materiaal (BOD, COD). Hoewel er een duidelijke relatie is met de stikstofhuishouding, algen en detritus (= dood organisch materiaal van natuurlijke herkomst) zullen deze componenten slechts in beperkte mate in deze paragraaf worden belicht. Voor een meer gedetailleerde beschouwing van de stikstofhuishouding en algen + detritus wordt verwezen naar respektievelijk de

paragrafen 4.3 en 4.5.

In figuur 4.1 is de plaats van de zuurstofhuishouding aangegeven in de integrale modelstructuur van MODQUAL. In het model is verondersteld dat het chemisch zuurstofverbruik (COD) twee componenten omvat, te weten, (1) een gedeelte dat het zuurstofverbruik aangeeft nodig voor een biochemische afbraak (oxydatie) van het organisch materiaal (BOD) (2) het zuurstofverbruik dat nodig is om de resterende, niet biochemisch afbreekbare stoffen, op chemische wijze (m.b.v. kaliumbichromaat,  $K_2Cr_2O_7$ ) verder te oxyderen.

Deze vorm van chemische oxydatie kan worden beschouwd als een nagenoeg volledige oxydatie van organisch koolstof. Een maat van het 'natuurlijke' biochemische zuurstofverbruik wordt verkregen door middel van de zogenaamde BOD<sub>5</sub>-proef. Bij deze proef wordt onder laboratoriumkondities (20°C) het zuurstofverbruik van het water bepaald gedurende een periode van 5 dagen. Hierbij wordt over het algemeen de oxydatie van stikstofcomponenten onderdrukt via een toegevoegd chemisch middel (allylthiourem), dat de groei van nitrificerende bacteriën afremt.

Bij de interpretatie van de BOD<sub>5</sub>-proef als basis voor de bepaling van het zuurstofverbruik in de rivier is het van belang te weten hoe groot het maximale zuurstofverbruik is dat ten behoeve van de natuurlijke (biochemische) oxydatie van organisch koolstof nodig zal zijn. Indien wordt aangenomen dat de afbraak van organisch koolstof verloopt volgens een 1<sup>e</sup> orde proces dan kan op eenvoudige wijze de maximale biochemische zuurstofbehoefte ( $BOD_{\infty}$ ) worden afgeleid uit de BOD<sub>5</sub>-proef volgens,

$$BOD_{\infty} = \frac{BOD_5^{20}}{1 - e^{-5 \cdot K_{lab}^{20}}}$$

Helaas is de afbraakconstante  $K_{lab}^{20}$  over het algemeen onbekend zodat een nauwkeurige bepaling van  $BOD_{\infty}$  onmogelijk is. Op basis van literatuurgegevens (zie o.a. Imhoff [2]) lijkt  $K_{lab}^{20} = 0,23 \text{ dag}^{-1}$  een redelijke waarde zodat,

$$BOD_{\infty} \approx 1,46 \cdot BOD_5^{20}$$

Als illustratie is in figuur 4.2 het zuurstofverbruik voor de oxydatie van organisch koolstof uitgezet in de tijd, waarbij de betekenis van het BOD<sub>5</sub>,  $BOD_{\infty}$  en COD-gehalte nader is aangeduid. Het COD-gehalte is derhalve te karakteriseren door het  $BOD_{\infty}$ -gehalte en een gedeelte dat niet op natuurlijke wijze

kan worden afgebroken (niet biochemische oxydeerbare organische koolstof) [3].

Aan de hand van figuur 4.1 kan worden geresumeerd dat de zuurstofhuishouding in een rivier benevens transportprocessen (advektie, dispersie) wordt beïnvloed door een aantal fysische, (bio)chemische en biologische processen.

Dit betreft:

- zuurstofuitwisseling via het grensvlak lucht/water (a)
- zuurstofproductie (fotosynthese) en respiratie door algen (b)
- zuurstofverbruik bij afbraak van detritus (c)
- zuurstofverbruik door de bodem (d)
- zuurstofverbruik bij biochemische afbraak van organische koolstof (e)
- bezinking van biochemisch afbreekbare organische koolstof (f)
- bezinking van niet biochemisch oxydeerbare stoffen (g)
- zuurstofverbruik bij oxydatie van  $\text{NH}_4$  tot  $\text{NO}_2$  (1e trap nitrifikatie) (h)
- zuurstofverbruik bij oxydatie van  $\text{NO}_2$  tot  $\text{NO}_3$  (2e trap nitrifikatie) (i)

De mathematische formulering van de reaktieterm in vergelijking (2), (zie par. 2.1) luidt voor,

zuurstof (C);

$$K_2(C_s - C) + (\alpha_3\mu - \alpha_4\rho)A - \alpha_3\delta D - \frac{K_4}{H} - K_1L - \alpha_5\beta_1N_1 - \alpha_6\beta_2N_2$$

(a)                      (b)                      (c)                      (d)                      (e)                      (h)                      (i)

biochemisch zuurstofverbruik (L);

$$- K_1L - \frac{K_3}{H} L$$

(e)                      (f)

niet biochemische oxydeerbare stoffen ( $L_2$ );

$$- \frac{K_5}{H} L_2$$

(g)

De procesparameters voor algengroei ( $\mu$ ), algenrespiratie ( $\rho$ ), afbraak van detritus ( $\delta$ ) en nitrifikatie ( $\beta_1$ ,  $\beta_2$ ) worden in de paragrafen 4.3 en 4.5 nader gespecificeerd. Dit geldt tevens voor de waterkwaliteitsvariabelen voor algen (A), detritus (D), ammonium ( $N_1$ ) en nitriet ( $N_2$ ).

De proceskonstanten  $\alpha_3$  en  $\alpha_4$  geven aan hoeveel zuurstof wordt geproduceerd en verbruikt door algen. De hoeveelheid zuurstof, die wordt verbruikt bij het nitrifikatieproces wordt aangegeven door  $\alpha_5$  (1e trap) en  $\alpha_6$  (2e trap).

De op basis van literatuurgegevens aangenomen waarden voor  $\alpha_3$  en  $\alpha_4$  en de uit de nitrifikatie vergelijkingen af te leiden waarden voor  $\alpha_5$  en  $\alpha_6$  zijn:

$$\begin{aligned}\alpha_3 &= 100 \text{ gO}_2/\text{Chl-a} \\ \alpha_4 &= 100 \text{ gO}_2/\text{Chl-a} \\ \alpha_5 &= 3,4 \text{ gO}_2/\text{gN} \\ \alpha_6 &= 1,1 \text{ gO}_2/\text{gN}\end{aligned}$$

De procesparameters voor zuurstofuitwisseling met de atmosfeer ( $K_2$ ), voor afbraak van BOD-C ( $K_1$ ), voor bodemrespiratie ( $K_4$ ), alsmede de zuurstofverzadigingswaarde ( $C_s$ ), worden door MODQUAL berekend op basis van de lokale temperatuur (T), stroomsnelheid (v) en diepte (H). Hiervoor wordt gebruik gemaakt van de volgende relaties;

$$K_2 = 3,86 \frac{v^{0,5}}{H^{1,5}} * 1,0159^{(T-20)} \quad (\text{O'Connor en Dobbins [4]})$$

$$K_1 = K_1^{20} * 1,047^{(T-20)}$$

$$K_4 = K_4^{20} * 1,07^{(T-20)}$$

$$C_s = 14,64 - 0,4106 T + 0,00795 T^2 - 0,0000776 T^3$$

Door middel van kalibratie op het rivierstelsel van de Rijn dienen voor de zuurstofhuishouding de volgende procesparameters te worden ingesteld.

procesparameter	literatuurrange <sup>1)</sup>	
afbraakconstante BOD-C ( $K_1^{20}$ )	0,10 - 0,90 d <sup>-1</sup>	2)
bodemrespiratie ( $K_4^{20}$ )	0,15 - 4,0 gO <sub>2</sub> /m <sup>2</sup> .d	
bezinksnelheid BOD-C ( $K_3$ )	0 - 2,0 m/d	
bezinksnelheid L <sub>2</sub> ( $K_5$ )	0 - 2,0 m/d	

1) Dit betreft de range waarbinnen op basis van literatuurgegevens de waarde voor de Rijn mag worden verwacht.

2) Opgemerkt dient te worden dat de afbraakconstante van BOD-C tevens afhankelijk is van de mate van afvalwaterzuivering [3], [5]. In het kader van het projekt is nagegaan op welke wijze deze afhankelijkheid in het model kan worden ingebouwd. Hiertoe zijn de volgende mogelijkheden bestudeerd:

a) het gebruik van de door Wolf [5] voorgestelde relatie voor  $K_1^{20}$  waarbij,

$$K_1^{20} = \frac{0,4}{\sqrt{\frac{70}{100-\eta}}} \cdot f_c \quad \text{voor } \eta \leq 30\%$$

$$K_1^{20} = 0,4 \cdot f_c \quad \text{voor } \eta > 30\%$$

Deze afhankelijkheid voor  $K_1^{20}$  van de zuiveringsgraad  $\eta$  is geïllustreerd in figuur 4.3 voor een kalibratiefaktor  $f_c = 1,0$

b) het gebruik van een relatie voor  $K_1^{20}$  gebaseerd op  $\chi$ , de COD/BOD<sub>5</sub>-verhouding (excl. algen + detritus) [3], bijvoorbeeld;

$$K_1^{20} = K_1^{(1)} \cdot \exp\left(-\left(\frac{\chi - \kappa_1}{\kappa_2}\right)^2\right) + K_1^{(2)} \quad \text{voor } \chi \geq \kappa_1$$

$$K_1^{20} = K_1^{(1)} \quad \text{voor } \chi < \kappa_1$$

De afhankelijkheid van  $K_1^{20}$  en is geïllustreerd in figuur 4.4. De konstanten  $K_1^{(1)}$ ,  $K_1^{(2)}$ ,  $\kappa_1$  en  $\kappa_2$  dienen door kalibratie te worden ingesteld.

c) het indelen van de biochemisch oxydeerbare organische koolstof in afbreekbaarheidsklassen [6], bijvoorbeeld;

$$\text{moeilijk afbreekbaar } K_1^{20} = 0,05 \text{ d}^{-1}$$

$$\text{matig afbreekbaar } K_1^{20} = 0,2 \text{ d}^{-1}$$

$$\text{makkelijk afbreekbaar } K_1^{20} = 0,5 \text{ d}^{-1}$$

Deze indeling kan in navolging van het onder (a) genoemde plaatsvinden op basis van de zuiveringsgraad van de lozingen.



In hoofdstuk 5 zal nader worden ingegaan op de keuze van de te gebruiken relatie en de kalibratie hiervan.

Voor een vergelijk met de gemeten waterkwaliteitsvariabelen (BOD<sub>5</sub>, COD) is het noodzakelijk de volgende transformaties toe te passen;

$$\text{BOD}_5 \text{ (berekend)} = f_1 \cdot L + f_2 \cdot \alpha_3 A + f_3 \cdot \alpha_3 D$$

$$\text{COD (berekend)} = L + L_2 + \alpha_3 A + \alpha_3 D$$

de factoren  $f_1$ ,  $f_2$  en  $f_3$  zijn gebaseerd op de BOD<sub>5</sub><sup>20</sup>-proef, waarvoor is verondersteld dat BOD-C (L) volgens een 1e ordeproces afbreekt met  $K_{\text{lab}}^{20} = 0,23 \text{ dag}^{-1}$ , de helft van de algen afbreekt met een afbraakconstante van  $0,1 \text{ dag}^{-1}$  en detritus eveneens afbreekt met  $0,1 \text{ dag}^{-1}$ , zodat

$$f_1 = 1 - e^{-0,23 \cdot 5} = 0,68$$

$$f_2 = 0,5 (1 - e^{-0,10 \cdot 5}) = 0,20$$

$$f_3 = 1 - e^{-0,10 \cdot 5} = 0,39$$

#### 4.3 Processen met betrekking tot stikstofhuishouding

De stikstofhuishouding omvat als gemodelleerde toestandsvariabelen het organisch stikstof (org-N), ammonium (NH<sub>4</sub>-N), nitriet (NO<sub>2</sub>-N) en nitraat (NO<sub>3</sub>-N). Tevens zijn van belang de gemeten waterkwaliteitsvariabelen Kjeldahl-stikstof (org-N + NH<sub>4</sub>-N) en totaal-stikstof. De belangrijkste interacties tussen deze waterkwaliteitsvariabelen en de relaties met de zuurstofhuishouding en met algen en detritus zijn aangegeven in figuur 4.5. De processen die van direct belang zijn voor de stikstofhuishouding betreffen,

- bezinking van organisch + partikulair stikstof (j)
- ammonifikatie van organisch stikstof (k)
- vrijkomen van NH<sub>4</sub> uit het sediment (l)
- oxydatie van NH<sub>4</sub> tot NO<sub>2</sub> (1e trap nitrifikatie) (m)
- oxydatie van NO<sub>2</sub> tot NO<sub>3</sub> (2e trap nitrifikatie) (n)
- denitrifikatie van NO<sub>3</sub> (o)

vrijkomen van  $\text{NH}_4$  bij afbraak van detritus (p)

opname van  $\text{NH}_4$ , danwel  $\text{NO}_3$  door algen (q)

De mathematische formulering in MODQUAL van de reaktieterm in vergelijking (2), (zie par. 2.1) luidt voor,

organische stikstof ( $\text{N}_0$ );

$$-\frac{\beta_3}{H} - \beta_0 \text{N}_0$$

(j)      (k)

ammonium ( $\text{N}_1$ );

$$+ \beta_0 \text{N}_0 + \frac{\beta_4}{H} - \beta_1 \text{N}_1 + \alpha_1 \delta D - \gamma \alpha_1 \mu A$$

(k)      (l)      (m)      (p)      (q)

nitriet ( $\text{N}_2$ );

$$+ \beta_1 \text{N}_1 - \beta_2 \text{N}_2$$

(m)      (n)

nitraat ( $\text{N}_3$ );

$$+ \beta_2 \text{N}_2 - \frac{\beta_5}{H} \text{N}_3 - (1-\gamma) \alpha_1 \mu A$$

(n)      (o)      (q)

De procesparameters voor algengroei ( $\mu$ ) en afbraak van detritus ( $\delta$ ), alsmede de bijbehorende waterkwaliteitsvariabelen voor algen (A) en detritus (D) worden in paragraaf 4.5 nader gespecificeerd.

De proceskonstante  $\alpha_1$  geeft aan hoeveel stikstof wordt opgenomen bij de groei van de algenbiomassa,  $\gamma$  geeft aan hoe groot de ammonium-fractie is bij de stikstofopname door algen. De op basis van literatuurgegevens aangenomen waarden zijn:

$$\alpha_1 = 6,0 \quad \text{gN/gChl-a}$$

$$\gamma = 1,0 \quad (\text{mits de } \text{NH}_4\text{-N konzentratie voldoende hoog is})$$

De procesparameters voor ammonifikatie ( $\beta_0$ ), 1e trap nitrifikatie ( $\beta_1$ ) 2e trap nitrifikatie ( $\beta_2$ ), het vrijkomen van ammonium uit de bodem ( $\beta_4$ ) en denitrifikatie ( $\beta_5$ ) worden door MODQUAL berekend op basis van de lokale temperatuur. Hiervoor worden de volgende relaties gehanteerd:

$$\beta_0 = \beta_0^{20} \cdot 1,047^{(T-20)}$$

$$\beta_1 = \beta_1^{20} \cdot 1,07^{(T-20)}$$

$$\beta_2 = \beta_2^{20} \cdot 1,03^{(T-20)}$$

$$\beta_4 = \beta_4^{20} \cdot 1,07^{(T-20)}$$

$$\beta_5 = \beta_5^{20} \cdot 1,06^{(T-20)}$$

Door middel van kalibratie op het rivierstelsel van de Rijn dienen voor de stikstofhuishouding de volgende parameters te worden ingesteld.

procesparameter	literatuurrange <sup>1)</sup>	
ammonifikatie konstante ( $\beta_0^{20}$ )	0,05 - 0,50 d <sup>-1</sup>	2)
nitrikatie (1e trap) konstante ( $\beta_1^{20}$ )	0,01 - 0,25 d <sup>-1</sup>	2)
nitrikatie (2e trap) konstante ( $\beta_2^{20}$ )	0,10 - 2,0 d <sup>-1</sup>	2)
bezinksnelheid org-N ( $\beta_3$ )	0 - 2,0 m/d	
vrijkomen van ammonium ( $\beta_4^{20}$ )	0 - 0,5 gN/m <sup>2</sup> .d	
denitrikatie ( $\beta_5^{20}$ )	0 - 2,0 gN/m <sup>2</sup> .d	2)

- 1) Dit betreft de range waarbinnen op basis van literatuurgegevens de waarde voor de Rijn mag worden verwacht.
- 2) Evenals de afbraakkonstante voor BOD-C kunnen deze procesparameters worden beïnvloed door de belasting op het oppervlaktewater. Uit de literatuur kan worden afgeleid dat voor lage zuurstofgehalten (< 2 mgO<sub>2</sub>/l) de nitrikatiesnelheid afneemt of zelfs geheel achterwege blijft, terwijl de denitrikatie toeneemt.

Voor een vergelijk met de gemeten waterkwaliteitsvariabelen is het noodzakelijk de volgende transformaties toe te passen.

$$\text{org-N (berekend)} = N_0 + \alpha_1 A + \alpha_1 D$$

$$\text{Kjeldahl-N (berekend)} = \text{org-N (berekend)} + N_1$$

$$\text{totaal-N (berekend)} = \text{org-N (berekend)} + N_1 + N_2 + N_3$$

#### 4.4 Processen met betrekking tot fosfaathuishouding

De fosfaathuishouding omvat als gemodelleerde toestandsvariabelen het organisch + partikulair fosfaat (org + part-P) en het ortho-fosfaat (ortho-P). Tevens is voor een vergelijk met de gemeten waterkwaliteit het totaal fosfaat (tot-P) van belang. De belangrijkste interacties tussen deze waterkwaliteitsvariabelen en de relatie met algen en detritus zijn aangegeven in figuur 4.6. De processen die van direct belang zijn voor de fosfaathuishouding betreffen,

bezinking van organische + partikulair fosfaat	(r)
mineralisatie en desorptie van organisch + partikulair P	(s)
adsorptie en coagulatie van ortho-P	(t)
vrijkomen van ortho-P uit het sediment	(u)
vrijkomen van ortho-P bij afbraak van detritus	(v)
opname van ortho-P door algen	(w)

De mathematische formulering in MODQUAL van de reaktieterm in vergelijking (2), (zie par. 2.1) luidt voor,

organisch en partikulair fosfaat ( $P_1$ );

$$-\frac{\sigma_2}{H} P_1 + f P_0$$

(r)      (s,t)

ortho-fosfaat ( $P_0$ );

$$-f P_0 + \frac{\sigma_3}{H} + \alpha_2 \delta D - \alpha_2 \mu A$$

(s,t)    (u)    (v)    (w)

De procesparameter voor algengroei ( $\mu$ ) en afbraak van detritus ( $\delta$ ) alsmede de bijbehorende waterkwaliteitsvariabelen voor algen (A) en detritus (D) worden in paragraaf 4.5 nader gespecificeerd.

De proceskonstante  $\alpha_2$  geeft aan hoeveel fosfaat wordt opgenomen bij de groei van de algenbiomassa. De op basis van literatuurgegevens aangenomen waarde is:

$$\alpha_2 = 0,75 \text{ gP/g Chl-a}$$

De procesparameter voor het vrijkomen van ortho-P uit de bodem wordt door MODQUAL berekend op basis van de lokale temperatuur (T). Hiervoor wordt de volgende relatie gehanteerd:

$$\sigma_3 = \sigma_3^{20} \cdot 1,07^{(T-20)}$$

Door middel van kalibratie op het rivierstelsel van de Rijn dienen voor de fosfaathuishouding de volgende procesparameters te worden ingesteld:

procesparameter	literatuurrangel)
bezinksnelheid org + part P ( $\sigma_2$ )	0 - 2,0 m/d
netto adsorptieconstante voor ortho-P (f)	0,01 - 1,0 d <sup>-1</sup> 2)
vrijkomen van ortho-P uit de bodem ( $\sigma_3$ )	0 - 0,02 g/m <sup>2</sup> .d

- 1) Dit betreft de range waarbinnen op basis van literatuurgegevens de waarde voor de Rijn mag worden verwacht.
- 2) Afhankelijk van eventuele coagulatie mogelijkheden met Fe<sup>3+</sup> of Ca<sup>2+</sup> (afhankelijk van de pH).

Voor een vergelijk met de gemeten waterkwaliteitsvariabelen is het noodzakelijk de volgende transformaties toe te passen:

$$\text{org + part-P (berekend)} = P_1 + \alpha_2 A + \alpha_2 D$$

$$\text{totaal-P (berekend)} = \text{org + part-P (berekend)} + P_0$$

#### 4.5 Processen met betrekking tot algen en detritus

Bij de modellering is aangenomen dat detritus bestaat uit organisch materiaal met dezelfde samenstelling als de algenbiomassa. Derhalve wordt de hoeveelheid detritus evenals de hoeveelheid algen uitgedrukt in chlorofyl-a.

De interrelaties tussen algen en detritus en de zuurstof-, stikstof-, en fosfaathuishouding zijn aangegeven in figuur 4.7. De processen, die van direct belang zijn voor de modellering van algen en detritus betreffen:

groei en respiratie van algen	(b,q,w)
afsterving van algen	(x)
bezinking van algen	(y)
bezinking van detritus	(z)
afbraak van detritus	(c,p,v)

De mathematische formulering in MODQUAL van de reaktieterm in vergelijking (2), (zie par. 2.1) luidt voor,

algen (A);

$$(\mu - \rho)A - \sigma_1 A - \frac{\sigma_5}{H} A$$

(b,q,w)    (x)    (y)

detritus (D);

$$+ \sigma_1 A - \delta D - \frac{\sigma_6}{H} D$$

(x) (c,p,v) (z)

De procesparameters voor algengroei ( $\mu$ ), algenrespiratie ( $\rho$ ), algensterfte ( $\sigma_1$ ) en detritusafbraak ( $\delta$ ) worden door het model MODQUAL berekend op basis van lokale temperatuur (T), daglichtlengte (d), achtergrondextinctie ( $\epsilon_0$ ) en diepte (H). Hiervoor is gebruik gemaakt van de volgende relaties,

$$\mu = \mu_{\max}^{20} \cdot \frac{T}{20} \cdot d \cdot \frac{K_L}{H(\epsilon_0 + \epsilon_s \cdot A)}$$

$$\rho = f_r \cdot \mu_{\max}^{20} \frac{T}{20}$$

$$\sigma_1 = f_d \cdot \mu_{\max}^{20} \frac{T}{20}$$

$$\delta = \delta^{20} \cdot 1,047^{(T-20)}$$

Voor de berekening van algengroei is aangenomen dat de nutriënten in het gemodelleerde rivierstelsel van de Rijn in voldoende mate aanwezig zijn, waardoor de groeisnelheid van algen wordt bepaald door het lichtklimaat en de temperatuur.

De proceskonstanten voor de beschikbaarheid van licht ( $K_L$ ) en de specifieke extinctie van algen ( $\epsilon_s$ ) zijn bepaald op basis van literatuurgegevens. De

aangenomen waarden zijn

$$K_L = 3,5$$

$$\epsilon_s = 16 \quad (\text{m.mgChl-a})^{-1}$$

Door middel van kalibratie op de Rijn dienen voor de modellering van algen en detritus de volgende procesparameters te worden ingesteld:

procesparameter	literatuurrange <sup>1)</sup>
maximale algengroeisnelheid ( $\mu_{\text{max}}^{20}$ )	0,5 - 2,5 d <sup>-1</sup>
parameter voor algenrespiratie ( $f_2$ )	0,05 - 0,20
parameter voor algensterfte ( $f_d$ )	0,05 - 0,20
afbraakconstante voor detritus ( $\delta^{20}$ )	0,05 - 0,50 d <sup>-1</sup>
bezinksnelheid algen ( $\sigma_5$ )	0 - 2,0 m/d
bezinksnelheid detritus ( $\sigma_6$ )	0 - 2,0 m/d

Vanwege het ontbreken van gegevens dient tevens een schatting te worden gemaakt van de achtergrondextinctie ( $\epsilon_0$ ). Bij deze schatting is gebruik gemaakt van de volgende relaties tussen extinctie van het water en de zichtdiepte bepaling met behulp van een Secchi-schijf ( $z_s$ ),

$$\epsilon_0 = \frac{1,9}{z_s}$$

Voor de Rijn is deze zichtdiepte geschat op 0,5 à 2,0 m. Vanwege deze ruwe benadering is  $\epsilon_0$  eventueel te beschouwen als een kalibratiegrootheid.

## 5 Kalibratie, verifikatie en gevoeligheidsonderzoek

### 5.1 Algemeen

Onder het kalibreren van het model wordt in dit hoofdstuk voornamelijk verstaan het binnen de ranges van de literatuur bijstellen van die procesparameters, die beïnvloed kunnen worden door specifieke omstandigheden in een rivierstelsel. Specifieke omstandigheden hebben betrekking op factoren als bacteriële activiteit, bodemgesteldheid, turbulentiegraad e.d. De kalibratie richt zich derhalve voornamelijk op de in hoofdstuk 4 aangegeven procesparameters, zoals reactie-konstanten en bezinksnelheden. Opgemerkt dient te worden dat voorafgaand aan de kalibratie van het in de hoofdstukken 2 t/m 4 beschreven waterkwaliteitsmodel, de toepassing van het oorspronkelijke QUAL-II model [7] op de Rijn heeft bijgedragen tot de uiteindelijke modelformulering. Uit eerdere simulaties zowel voor de Rijn als Maas is gebleken dat het basismodel diende te worden uitgebreid met, (1) modulen voor een afzonderlijke modellering van organisch stikstof en ammonium, in plaats van Kjeldahl-stikstof, (2) afzonderlijke modulen voor de modellering van ortho-fosfaat en organisch + partikulair fosfaat, inplaats van totaal fosfaat, (3) een module voor de modellering van COD en (4) een module voor de modellering van detritus. Tevens zijn een aantal procesbeschrijvingen aangepast, waaronder het denitrifikatieproces, de afbraak van BOD, de processen met betrekking tot algendynamiek e.d., alsmede de invloed van algen en detritus op BOD<sub>5</sub>, COD, Kj-d-N en org+part-P. De in dit hoofdstuk gepresenteerde kalibratie en verifikatie van het model zal zich evenwel beperken tot de resultaten van het in de hoofdstukken 2 t/m 4 beschreven modelconcept van het waterkwaliteitsmodel Rijn (d.w.z. zowel het basismodel MODQUAL, als de voorbewerkingsprogramma's AFVOER, DIFCON en EMIS).

Zoals genoemd in hoofdstuk 2 is het basismodel MODQUAL gebaseerd op het steady-state principe. Dit heeft tot gevolg dat de toepasbaarheid van het model zich beperkt tot perioden die enkele malen groter zijn dan de looptijd van de rivier (ca. 10 dagen). Tevens dienen factoren als debiet en temperatuur gedurende de te simuleren perioden geen grote veranderingen te ondergaan.

Hoewel uit modelleringsoverwegingen gezocht zou moeten worden naar perioden, die zoveel mogelijk aan deze steady-state condities voldoen is uit toepassingsoverwegingen gekozen voor het simuleren van jaargemiddelden en maandgemiddelden. Hierbij dient te worden opgemerkt dat weliswaar de toepasbaarheid van het model niet voor iedere simulatie-periode zal kunnen worden gerecht-



vaardigd, maar dat op deze wijze een beter inzicht kan worden verkregen in beperkingen van het model.

Vanwege de beschikbaarheid van de gegevens van afvalwaterlozingen voor 1973 en 1977 (IRC-inventarisaties), heeft de toepassing van het model zich vooral gericht op deze 2 jaren.

De kalibratie van het model heeft voornamelijk plaatsgevonden op basis van de simulatie van het jaargemiddelde van 1973. De wijze waarop deze kalibratie is verricht kan worden gekarakteriseerd door de methode van 'trial and error', waarbij de berekeningsresultaten zijn vergeleken met het gemiddelde van de gemeten waterkwaliteitsvariabelen op de verschillende meetstations. Teneinde het aantal vrijheidsgraden in de kalibratie te beperken is verondersteld dat de te kalibreren parameters voor het gehele stroomgebied dezelfde waarden hebben, tenzij er duidelijke redenen aanwezig zijn om hiervan af te wijken. Voor de toetsing van het model, zowel voor kalibratie als verificatie, is verkozen deze zoveel mogelijk te betrekken op de meetresultaten van de meetstations van de Internationale Rijncommissie (IRC). Zowel het analyse-pakket van deze stations, waarvan de gemeten waterkwaliteitsvariabelen het nauwst aansluiten bij de in MODQUAL gemodelleerde waterkwaliteitscomponenten, als de meetfrequentie en onderlinge afstemming van de analyse methodieken hebben mede tot deze keuze geleid.

De IRC-metstations zijn als volgt gesitueerd

IRC - station	rivier	kilometrage
Stein	Rijn	28
Kembs	Rijn	183
Seltz	Rijn	340
Braubach	Rijn	581
Koblenz	Moezel	(595)
Lobith	Rijn	865
Kampen	IJssel	896
Vreeswijk	Lek	952
Gorinchem	Waal	955

Bij de toetsing van de jaargemiddelde simulaties, zijn voor deze stations, naast de jaargemiddelden van de meetresultaten, tevens de bijbehorende 95% betrouwbaarheidsintervallen opgenomen. Van de overige meetstations zijn alleen de jaargemiddelde meetresultaten bij de toetsing betrokken.

De toetsing van de maandgemiddelde simulaties heeft vooral plaatsgevonden op de meetresultaten te Lobith, zoals die zijn opgeslagen in het WAKWAL-bestand van Rijkswaterstaat. Deze gegevens omvatten naast de in het kader van de IRC uitgevoerde metingen, tevens de routinematige metingen van het RIZA, waardoor de meetfrequentie 2 x zo hoog is als de bovenstrooms van Lobith gelegen IRC-stations. Tevens zijn de resultaten van de berekeningen vergeleken met de meetresultaten te Kampen en Gorinchem. Een vergelijking met de meetresultaten te Vreeswijk is slechts in beperkte mate mogelijk, vanwege het vooralsnog ontbreken van een optie in MODQUAL, waarbij rekening kan worden gehouden met het niet, gedeeltelijk danwel volledig gestuwd zijn van de Nederrijn/Lek. Teneinde inzicht te verkrijgen in de beperkingen van het model is gekozen voor een vergelijking van het verloop van de berekende maandgemiddelden, met het verloop van de individuele metingen ter plaatse van het betreffende meetstation.

In aanvulling op de reeds genoemde simulatie-jaren 1973 en 1977 is het model tevens toegepast op 1972 en 1974, waarvoor is verondersteld dat de emissie van afvalwaterlozingen dezelfde is als in 1973. Verder is het model toegepast op 1976, waarvoor is verondersteld dat de emissie van afvalwaterlozingen dezelfde is als in 1977. Vanwege de toepassing van het model op maandgemiddelde basis voor 1974, is tevens een toetsing mogelijk met het in eind juni 1974 uitgevoerde "fliesende Welle" onderzoek van de IRC.

## 5.2 Modelresultaten van de jaargemiddelde simulatie voor 1973 (kalibratie)

### Randvoorwaarden

Het debiet en de temperatuur kunnen worden beschouwd als de belangrijkste randvoorwaarde voor de waterkwaliteitsberekening.

De invloed van het debiet op de waterkwaliteit heeft betrekking op aspecten als, de emissie-bijdrage van diffuse bronnen, verdunning van afvalwater, stroomsnelheid (looptijd) en diepte. Vanwege de relatief lage 'achtergrond' concentraties van het vanuit Zwitserland toestromende water, ten opzichte van de 'achtergrond' concentraties vanuit Frankrijk en Duitsland, wordt de emissie-bijdrage van diffuse bronnen in de Rijn voor een belangrijk deel bepaald door de verhouding van de vanuit deze gebieden toestromende debieten. Dit heeft tot gevolg dat met name de achtergrond concentraties van nutriënten in de zomerperiode lager zijn als gevolg van het grotere aandeel van het vanuit Zwitserland toestromend debiet.

Daarnaast zal een toename van het debiet over het algemeen een daling van de concentraties veroorzaken voor die stoffen, die voornamelijk afkomstig zijn van afvalwaterlozingen. Aangezien de vracht van deze lozingen konstant is verondersteld zal de invloed van een groter debiet resulteren in een groter verdunningseffekt en derhalve lagere concentraties. Deze invloed van het debiet kan echter gedeeltelijk worden verminderd als gevolg van een toename van de stroomsnelheid, waardoor de invloed van afbraak en sedimentatieprocessen bij een hoger debiet zal afnemen.

De invloed van de temperatuur heeft voornamelijk betrekking op de waterkwaliteitsprocessen waarvan een groot gedeelte temperatuurgevoelig is (zie hoofdstuk 4). Over het algemeen kan worden gesteld dat als gevolg hiervan de invloed van temperatuurgevoelige processen op de concentraties in de zomerperiode groter is dan in de winterperiode.

Het kalibratie-jaar 1973 kan hydrologisch worden gekarakteriseerd als een betrekkelijk droog jaar. Dit kan direkt worden afgeleid uit het vergelijk van het jaargemiddelde debiet voor 1973 te Lobith ( $1754 \text{ m}^3/\text{s}$ ) met het langjarig gemiddelde debiet ( $2216 \text{ m}^3/\text{s}$ ) voor de periode 1901-1970.

In figuur 5.1 is voor het kalibratie-jaar het gesimuleerde jaargemiddelde verloop van het debiet uitgezet van Stein (28 km) tot Kampen (995 km), tesamen met de gemiddelde waarde van de tijdens de bemonsteringsdagen van waterkwaliteit gemeten debieten. Verschillen tussen het gesimuleerde debiet en de debieten van de meetstations worden veroorzaakt door, (1) het beperkte aantal bemonsteringsdagen en (2) onvolkomenheden bij het opstellen van een volumebalans.

De belangrijkste debiettoenames in de Rijn worden veroorzaakt door de Aare (100 km), Neckar (430 km), Main (500 km) en de Moezel (600 km). De afname van het debiet op 870 km en 880 km betreft de afsplitsing van respectievelijk de Waal en Nederrijn/Lek.

Het voor deze simulatie aangenomen temperatuurverloop is uitgezet in figuur 5.2, tesamen met de uit de temperatuurmetingen afgeleide gemiddelde waarden. De temperatuurverschillen op het traject Stein tot Kampen beperken zich over het algemeen tot enkele graden celsius. Uit de grootte van het 95% betrouwbaarheids interval van de gemiddelde temperatuur op de IRC-stations is evenwel af te leiden dat de seizoenvariaties vele malen groter zijn. Karakteristieke zomer- en wintertemperaturen voor de Rijn zijn respectievelijk  $20-24^\circ\text{C}$  en  $4-8^\circ\text{C}$ .

### Zuurstofhuishouding

De kalibratie van de zuurstofhuishouding betreft voornamelijk het instellen van de afbraakconstante van BOD-C ( $K_1^{20}$ ), de bezinksnelheid van BOD-C ( $K_3$ ) en de bezinksnelheid van de niet biochemische oxydeerbare stoffen ( $K_5$ ). Vanwege de toegenomen zuivering van afvalwater in het stroomgebied van de Rijn mag worden verwacht dat de samenstelling van de netto belasting door afvalwaterlozingen verandert. Er zal daarbij voornamelijk een reductie plaatsvinden van de gemakkelijk afbreekbare stoffen, waardoor de afbreekbaarheid van het geloosde afvalwater zal afnemen. Dit heeft tot gevolg dat de afbraakconstante voor BOD-C geen konstante is, maar een functie van de mate van zuivering. Teneinde met dit aspect rekening te houden is aanvankelijk gebruik gemaakt van de door Wolf [5] voorgestelde relatie, waarbij de afbraakconstante een functie is van de zuiveringsgraad volgens figuur 4.3. Het bepalen van de lokale zuiveringsgraad in de Rijn is vanwege de agglomeratie van ongezuiverd, gezuiverd en gedeeltelijk gezuiverd afvalwater, alsmede de invloed van afbraak en sedimentatie in het rivierstelsel niet goed mogelijk. Om deze reden is in navolging van Esser [3] getracht de afbraakconstante te beschrijven als een functie van de verhouding COD/BOD<sub>5</sub> van het afvalwater volgens figuur 4.4.

De 4 parameters  $K_1^{(1)}$ ,  $K_1^{(2)}$ ,  $\kappa_1$  en  $\kappa_2$  zijn slechts gedeeltelijk door kalibratie ingesteld. Aangenomen is dat voor een COD/BOD<sub>5</sub>-verhouding van 2,5 ( $\approx$  ongezuiverd afvalwater), de afbraaksnelheid maximaal is ( $\kappa_1=2,5$ ).

Voor grotere COD/BOD<sub>5</sub>-verhoudingen zal de afbraakconstante  $K_1^{(20)}$  afnemen tot een minimale waarde gelijk aan  $K_1^{(2)}$ .

Voor deze minimale afbraaksnelheid is verondersteld  $K_1^{(2)} = 0,05 \text{ dag}^{-1}$ .

De parameters  $K_1^{(1)}$  en  $\kappa_2$  zijn door middel van kalibratie op het jaargemiddelde van 1973 ingesteld op respectievelijk  $K_1^{(1)} = 0,8 \text{ dag}^{-1}$  en  $\kappa_2 = 3,0$ .

De aldus berekende afbraakconstante van BOD-C ( $K_1^{20}$ ) varieert voor de simulatie van het jaargemiddelde van 1973 van ca.  $0,70 \text{ dag}^{-1}$ , nabij 430 km, tot ca.  $0,20 \text{ dag}^{-1}$ , voor de Nederlandse Rijntakken.

Voor de bodemrespiratie ( $K_4^{20}$ ) is een waarde ingesteld van  $1 \text{ g O}_2/\text{m}^2 \text{ dag}$  voor het ongestuwde deel en  $2 \text{ g O}_2/\text{m}^3 \text{ dag}$  voor het gestuwde deel van het rivierstelsel.

De bezinksnelheid ( $K_3$ ) van BOD-C, afkomstig van afvalwater, is door middel van kalibratie ingesteld op  $0,3 \text{ m/dag}$  voor het ongestuwde deel en  $0,5 \text{ m/dag}$  voor het gestuwde deel van het rivierstelsel.

De bezinksnelheid ( $K_5$ ) van de niet biochemische oxydeerbare stoffen is voor het ongestuwde deel verwaarloosbaar verondersteld en voor het gestuwde deel

gesteld op 0,1 m/dag.

Opgemerkt dient te worden dat de waterkwaliteitscomponenten van de zuurstofhuishouding tevens worden beïnvloed door processen als nitrifikatie, algengroei, algenrespiratie en afbraak van detritus (zie derhalve tevens de kalibratie-resultaten van de stikstofhuishouding en algen+detritus).

In de figuren 5.3 t/m 5.5 zijn voor het kalibratie-jaar 1973 de resultaten weergegeven van respectievelijk zuurstof, BOD<sub>5</sub> en COD. Opmerkelijk is de sterke zuurstofdaling benedenstrooms van 430 km, die voornamelijk een gevolg is van de toen nog ongezuiverde lozing van de BASF-fabrieken ( $8,6 \cdot 10^6$  i.e.). De invloed van deze lozing blijkt tevens uit het verloop van het BOD<sub>5</sub> en COD gehalte. Andere lozingsinvloeden op het gesimuleerde verloop van het BOD<sub>5</sub>- en COD-gehalte zijn waarneembaar voor Rhone Poulenc ( $2,7 \cdot 10^6$  i.e.) op 200 km, lozingen te Strassbourg ( $3,9 \cdot 10^6$  i.e.) op 200 km, lozingen nabij Köln ( $7,6 \cdot 10^6$  i.e.), waaronder de lozing van de Bayer-fabrieken, op ca. 700 km en de lozing van de Emscher ( $3,7 \cdot 10^6$  i.e.) op ca. 800 km.

Een vergelijk van het berekende COD-gehalte met de gemeten waarden van COD is alleen mogelijk voor de IRC-stations. Op de overige meetstations is het COD-gehalte namelijk bepaald na filtratie.

#### Stikstofhuishouding

De kalibratie van de stikstofhuishouding betreft voornamelijk het instellen van de ammonifikatieconstante ( $\beta_0^{20}$ ), de nitrifikatie (1<sup>e</sup> trap) constante ( $\beta_1^{20}$ ), de nitrifikatie (2<sup>e</sup> trap) constante ( $\beta_2^{20}$ ), de bezinksnelheid van organisch stikstof ( $\beta_3$ ), het vrijkomen van ammonium uit de bodem ( $\beta_4^{20}$ ) en de constante voor denitrifikatie ( $\beta_5^{20}$ ).

Hoewel de kalibratie van de procesparameters met betrekking tot organisch stikstof is bemoeilijkt door het ontbreken van Kjeldahl-N metingen in Duitsland is de ammonifikatie-constante ( $\beta_0^{20}$ ) bepaald op  $0,15 \text{ dag}^{-1}$ . De bezinksnelheid van organisch stikstof is bepaald op  $0,10 \text{ m/dag}$  voor het ongestuwde deel en  $0,20 \text{ m/dag}$  voor het gestuwde deel van het rivierstelsel. Voor de kalibratie van de processen met betrekking tot ammonium is aangenomen dat het vrijkomen van ammonium uit de bodem verwaarloosbaar is ( $\beta_4^{20} = 0$ ). De nitrifikatie (1<sup>e</sup> trap) constante ( $\beta_1^{20}$ ) is bepaald op  $0,07 \text{ dag}^{-1}$ .

Op basis van de (summiere) nitrietgegevens is de nitrifikatie (2<sup>e</sup> trap) constante ( $\beta_2^{20}$ ) bepaald op  $1,0 \text{ dag}^{-1}$ .

Ten behoeve van modellering van nitraat is een geringe denitrifikatie ( $\beta_5^{20}$ ) aangenomen van 0,1 g N/m<sup>2</sup> dag in het ongestuwde deel en 0,3 g N/m<sup>2</sup> dag in het gestuwde deel.

Vanwege de lage zuurstofgehalten in de benedenloop van de Main, is de denitrifikatie ter plaatse verhoogd tot 0,5 g N/m<sup>2</sup> dag.

De resultaten van de modelberekening voor het kalibratie-jaar 1973 zijn weergegeven in de figuren 5.6 t/m 5.10 voor respectievelijk Kjeldahl-stikstof, ammonium, nitriet, nitraat en totaal stikstof.

Zoals reeds vermeld ontbreken voor Duitsland gegevens omtrent Kjeldahl-stikstof, waardoor ook de totaal stikstof-gehalten niet bekend zijn. Het enige vergelijk van deze variabelen is mogelijk voor de meetstations Lobith en Kampen.

Evenals bij de simulatie van BOD<sub>5</sub> kan de sterke stijging van het Kjeldahl stikstof op 430 km worden toegeschreven aan de afvalwaterlozing van de BASF-fabrieken. Deze stijging is ook waarneembaar bij de simulatie van ammonium. De stijging van nitraat kan voornamelijk worden toegeschreven aan de hogere achtergrondconcentratie van het vanuit Frankrijk en Duitsland toestromende water, via de Neckar (420 km), Main (500 km) en Moezel (600 km). Tevens is de stijging van nitraat het gevolg van de nitrifikatie van ammonium via nitriet tot nitraat. Opmerkelijk zijn de grote onderlinge verschillen van de gemiddelde nitraatconcentraties voor de verschillende meetstations. Een nauwkeurig vergelijk met de berekeningsresultaten is daardoor niet mogelijk.

#### Fosfaathuishouding

De kalibratie van de processen met betrekking tot de fosfaathuishouding betreffen de bezinksnelheid ( $\sigma_2$ ) van organisch+partikulair fosfaat, de netto adsorptieconstante (f) voor ortho-fosfaat en het vrijkomen van ortho-fosfaat uit de bodem ( $\sigma_3$ ).

Voor het vrijkomen van ortho-fosfaat uit de bodem is aangenomen dat de invloed hiervan verwaarloosbaar is, zodat  $\sigma_3 = 0$  g P/m<sup>2</sup> dag.

De adsorptie van ortho-fosfaat is via kalibratie bepaald op 0,02 dag<sup>-1</sup>. Voor het traject benedenstrooms van het Ruhr-gebied is echter een veel hogere adsorptieconstante bepaald (0,8 dag<sup>-1</sup>). Deze hoge adsorptieconstante kan worden toegeschreven aan de hoge ijzerconcentratie vanuit dit gebied (zie fliesende Welle onderzoek van de IRC [1]), waardoor het ortho-fosfaat coaguleert met Fe<sup>3+</sup> tot ijzeroxyde- en ijzerhydroxyde fosfaten. Deze ijzerfosfaten

zijn te beschouwen als partikulair fosfaat.

De bezinksnelheid van organisch+partikulair fosfaat is ingesteld op 0,2 m/dag voor het ongestuwde deel en 0,8 m/dag voor het gestuwde deel van de Rijn.

De resultaten van ortho-fosfaat zijn voor de jaargemiddelde simulatie voor het kalibratie-jaar 1973 opgenomen in respectievelijk 5.11 en 5.12.

Het vergelijk van de berekeningsresultaten van totaal fosfaat beperkt zich tot de stations Braubach, Lobith en Kampen. Mede vanwege onderlinge afwijkingen tussen de gemeten ortho-fosfaatgehalten is een nauwkeurig vergelijk van de simulatie-resultaten voor de fosfaathuishouding niet mogelijk.

#### Algen en detritus

De door middel van kalibratie in te stellen procesparameters voor algen en detritus betreffen de maximale groeisnelheid van algen ( $\mu_{\max}^{20}$ ), de parameters voor algenrespiratie ( $f_r$ ) en algensterfte ( $f_d$ ), de afbraakconstante voor detritus ( $\delta^{20}$ ) en de bezinksnelheden voor algen ( $\sigma_5$ ) en detritus ( $\sigma_6$ ).

Vanwege het ontbreken van chlorofyl-metingen in de Rijn tot 1976 is een kalibratie van algen voor 1973 niet mogelijk geweest. Uit de jaren na 1976 kan worden afgeleid dat een karakteristieke jaargemiddelde waarde te Lobith ca. 40  $\mu\text{g Chl-a/l}$  bedraagt. Mede omdat de modellering van algen moet worden gezien als het instellen van een soort randvoorwaarde voor de invloed van algen op de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding, is volstaan met een dusdanige instelling van de procesparameters dat hieraan wordt voldaan. De maximale algengroei ( $\mu_{\max}^{20}$ ) is bepaald op 2  $\text{dag}^{-1}$ . De algenrespiratie en algensterfte zijn bepaald op respectievelijk 5% en 7% van de maximale algengroei. Voor de afbraakconstante ( $\delta^{20}$ ) is 0,10  $\text{dag}^{-1}$  verondersteld en de bezinksnelheden van algen en detritus zijn ingesteld op respectievelijk 0 en 0,2 m/dag voor het ongestuwde deel en 0,2 en 0,5 m/dag voor het gestuwde deel van het rivierstelsel. Voor de achtergrondextinctie is een waarde aangenomen van 2,5  $\text{m}^{-1}$  voor het gehele rivierstelsel met uitzondering van de benedenloop van de Main, waarvan de achtergrondextinctie is gesteld op 3,5  $\text{m}^{-1}$ .

De resultaten van de algenberekening voor het kalibratie-jaar 1973 zijn opgenomen in figuur 5.13. Uit het verloop van de kromme kan worden afgeleid dat een geringe netto groei wordt gesimuleerd, waarbij het chlorofyl gehalte van Stein tot Lobith toeneemt van 30 tot 40  $\mu\text{g Chla/l}$ .

Het berekende detritus gehalte, dat niet alleen bestaat uit afgestorven algen-

materiaal, maar tevens biochemisch afbreekbaar materiaal bevat vanuit diffuse bronnen, bedraagt ca. 35 µg eq Chla/l.

Het aandeel van algen en detritus in het BOD<sub>5</sub> en COD gehalte, het gehalte aan organisch stikstof en het gehalte aan organisch+partikulair fosfaat, is voor de jaargemiddelde simulatie van het kalibratie-jaar als volgt:

	algen	detritus	algen+detritus	
BOD <sub>5</sub>	0,8	1,4	2,2	mg O <sub>2</sub> /l
COD	4,0	3,5	7,5	mg O <sub>2</sub> /l
org-N	0,24	0,21	0,45	mg N/l
org+part-P	0,03	0,03	0,06	mg P/l

Uit een vergelijk van deze bijdragen met de berekende en gemeten gehalten voor BOD<sub>5</sub>, COD, Kjeldahl-N en totaal-P kan worden afgeleid dat de algen en detritus een niet te verwaarlozen bijdrage leveren aan deze waterkwaliteitsvariabelen.

In verband met het vergelijk van de kalibratie-resultaten van de Waal en Nederrijn/Lek zijn in tabel 5.1 de gemeten en berekende waarden van de waterkwaliteitsvariabelen opgenomen van Gorinchem en Vreeswijk. Tevens zijn in deze tabel de gemeten en berekende waarden van Lobith en Kampen vermeld.

#### Samenvatting en conclusies van de kalibratie-resultaten

Hoewel de kalibratie-resultaten afzonderlijk zijn gepresenteerd voor de componenten van de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding, algen en detritus dient de kalibratie van de procesparameters vanwege de onderlinge relaties als één geheel te worden beschouwd.

Een overzicht van de ingestelde waarden van de te kalibreren procesparameters is opgenomen in tabel 5.2, tesamen met de in hoofdstuk 4 aangegeven literatuurrange voor omstandigheden die vergelijkbaar zijn met een rivier als de Rijn.

In het totaal zijn voor de kalibratie van de 11 gemodelleerde waterkwaliteitscomponenten 23 parameters ingesteld.

Opgemerkt dient te worden dat de nauwkeurigheid van de ingestelde waarden voor de procesparameters beperkt is, vanwege beperkingen in de nauwkeurigheid van, zowel de hydraulische-gegevens (diepte, stroomsnelheid), de emissie-gegevens (afvalwaterlozingen, diffuse bronnen), als de immissie-gegevens.



Uit de toepassing van het model op andere situaties zal moeten blijken in hoeverre de berekeningsresultaten van het model voldoende nauwkeurig zijn voor een verantwoorde voorspelling van voorgenomen en te formuleren beleids- en beheersscenario's.

waterkwaliteits- variabele	Lobith		Kampen		Vreeswijk		Gorinchem	
	gem.	ber.	gem.	ber.	gem.	ber.	gem.	ber.
Q (m <sup>3</sup> /s)	1719	1753	-	290	-	222	-	1241
T (°C)	12,8	13,3	12,4	13,3	11,8	13,3	12,5	13,3
O <sub>2</sub> (g/m <sup>3</sup> )	5,4	4,8	5,7	5,9	7,4	7,2	6,4	5,5
BOD <sub>5</sub> (g/m <sup>3</sup> )	8,5	8,0	6,2	6,5	5,9	4,8	6,4	6,7
COD (g/m <sup>3</sup> )	40	38	38	37	33	32	31	35
Kjd-N (g/m <sup>3</sup> )	4,0	4,1	4,1	4,0	3,4	3,6	3,8	4,0
NH <sub>4</sub> -N (g/m <sup>3</sup> )	2,6	2,5	2,7	2,6	2,3	2,5	2,6	2,5
NO <sub>2</sub> -N (g/m <sup>3</sup> )	-	0,11	-	0,16	-	0,17	-	0,14
NO <sub>3</sub> -N (g/m <sup>3</sup> )	2,8	2,9	2,9	3,0	2,9	3,1	2,8	2,9
tot-N (g/m <sup>3</sup> )	6,8	7,0	7,0	7,1	6,3	6,7	6,7	6,9
ortho-P (g/m <sup>3</sup> )	0,36	0,38	0,31	0,40	0,27	0,37	0,31	0,38
tot-P (g/m <sup>3</sup> )	0,98	0,85	0,73	0,76	0,65	0,65	0,68	0,79
Chl-a (mg/m <sup>3</sup> )	-	40	-	39	-	37	-	39

Tabel 5.1 Gemeten en berekende waterkwaliteit te Lobith, Kampen, Vreeswijk en Gorinchem (jaargemiddelde 1973)

in te stellen parameter	literatuur- range	gehele rivierstelsel	gestuwde delen	eenheid	opmerkingen
afbraakconstante BOD-C( $K_1^{20}$ )	0,10 - 0,9	0,20 - 0,70		dag <sup>-1</sup>	1)
constante voor de berekening van $K_1^{20}$ ( $K_1^{(1)}$ )		0,05		dag <sup>-1</sup>	1)
" ( $K_1^{(2)}$ )		0,80		dag <sup>-1</sup>	1)
" ( $\kappa_1$ )		2,5		-	1)
" ( $\kappa_2$ )		3,0		-	1)
bodemrespiratie ( $K_4^{20}$ )	0,5 - 4,0	1,0	2,0	gO <sub>2</sub> /m <sup>2</sup> .dag	
bezinksnelheid BOD-C ( $K_3$ )	0 - 2,0	0,3	0,5	m/dag	
bezinksnelheid L <sub>2</sub> ( $K_5$ )	0 - 2,0	0,0	0,1	m/dag	
ammonifikatie constante ( $\beta_0^{20}$ )	0,05 - 0,5	0,15		dag <sup>-1</sup>	
nitrifikatie (1e trap) constante ( $\beta_1^{20}$ )	0,01 - 0,25	0,07		dag <sup>-1</sup>	
nitrifikatie (2e trap) constante ( $\beta_2^{20}$ )	0,10 - 2,0	1,0		dag <sup>-1</sup>	
bezinksnelheid org-N ( $\beta_3$ )	0 - 2,0	0,10	0,20	m/dag	
vrijkomen van ammonium ( $\beta_4^{20}$ )	0 - 0,5	0		gN/m <sup>2</sup> .dag	
denitrifikatie ( $\beta_5^{20}$ )	0 - 2,0	0,10	0,30	gN/m <sup>2</sup> .dag	2)
bezinksnelheid org + part-P ( $\sigma_2$ )	0 - 2,0	0,2	0,8	m/dag	
netto adsorptie constante voor ortho-P ( $f$ )	0,01 - 1,0	0,02		dag <sup>-1</sup>	3)
vrijkomen van ortho-P uit de bodem ( $\sigma_3$ )	0 - 0,02	0		g/m <sup>2</sup> .dag	
maximale algengroeisnelheid ( $\mu_{max}^{20}$ )	1,5 - 2,5	2,0		dag <sup>-1</sup>	
parameter voor algenrespiratie ( $f_r$ )	0,05 - 0,2	0,05		-	
parameter voor algensterfte ( $f_d$ )	0,05 - 0,2	0,07		-	
afbraakconstante voor detritus ( $\delta^{20}$ )	0,05 - 0,5	0,10		dag <sup>-1</sup>	
bezinksnelheid algen ( $\sigma_5$ )	0 - 2,0	0	0,2	m/dag	
bezinksnelheid detritus ( $\sigma_6$ )	0 - 2,0	0,2	0,5	m/dag	
achtergrondextinctie ( $\epsilon_0$ )	1,0 - 4	2,5		m <sup>-1</sup>	

- 1) berekening op basis van COD/BOD<sub>5</sub>-relatie (figuur 4.4)
- 2) voor het benedenstroomse traject van de Main is vanwege de zeer lage zuurstofgehalten 0,50 gN/m<sup>2</sup>.dag verondersteld.
- 3) voor het traject van 730-780 km is vanwege de coagulatie met ijzer 0,8 dag<sup>-1</sup> aangenomen.

Tabel 5.2 Overzicht van de waarden van procesparameters zoals die zijn ingesteld bij de kalibratie op het jaarmiddelde van 1973

### 5.3 Modelresultaten van de jaargemiddelde simulatie voor 1977 (verifikatie)

#### Randvoorwaarden

In vergelijking tot het kalibratie-jaar 1973 is het jaargemiddelde debiet te Lobith voor het verifikatie-jaar 1977 beduidend hoger. Het voor 1977 bepaalde jaargemiddelde debiet (2221 m<sup>3</sup>/s) komt vrijwel overeen met de langjarige afvoer van de Rijn te Lobith voor de periode 1901-1970 (2216 m<sup>3</sup>/s).

Het verloop van het gesimuleerde debiet voor het traject vanaf Stein (28 km) tot Kampen (995 km) is uitgezet in figuur 5.14.

Het voor de simulatie aangenomen temperatuurverloop is vergelijkbaar met dat voor de simulatie van het jaargemiddelde van 1973 (figuur 5.15).

#### Zuurstofhuishouding

De berekeningsresultaten van de zuurstofhuishouding voor het jaargemiddelde van 1977 zijn opgenomen in de figuren 5.16 t/m 5.18 voor respectievelijk zuurstof, BOD<sub>5</sub> en COD. Voor de berekening zijn dezelfde waarden voor de procesparameters verondersteld zoals deze uit de kalibratie op het jaargemiddelde voor 1973 naar voren zijn gekomen (tabel 5.2). Uit de figuren kan worden afgeleid dat de verifikatie voor zuurstof goed kan worden genoemd, terwijl voor BOD<sub>5</sub> en COD een nauwkeurige toetsing niet mogelijk is, vanwege inkonsistenties tussen verschillende meetstations. Voor het BOD<sub>5</sub>-gehalte zijn met name de, in vergelijking met de IRC-stations, lage BOD<sub>5</sub>-gehalten van de Arge-Rhein stations opmerkelijk. Voor het COD-gehalte is een nauwkeurige toetsing niet mogelijk vanwege het feit dat op de IAWR-stations het bepalen van COD plaatsvindt na filtratie. Indien de toetsing van BOD<sub>5</sub> en COD vooral wordt gerelateerd aan de meetresultaten van de IRC-stations, kan worden gekonkludeerd dat de eerste verifikatie van het model ook voor deze waterkwaliteitsvariabelen bevredigend is verlopen.

Uit een vergelijking van de berekende zuurstofhuishouding voor 1973 en 1977 kan worden afgeleid dat de sanering van de afvalwaterlozing van de BASF-fabrieken, tesamen met de sanering van andere afvalwaterlozingen, heeft geleid tot een duidelijke vermindering van het BOD<sub>5</sub>-gehalte in de Rijn. Het zuurstofgehalte in de Rijn is, alsgevolg van het geringere zuurstofverbruik vooral over het traject van 430 tot 600 km, verbeterd.

Opgemerkt dient te worden dat als gevolg van de grotere zuiveringsgraad de

COD/BOD<sub>5</sub>-verhouding van het geloosde afvalwater is toegenomen waardoor de door het model berekende afbraakconstante voor BOD-C ( $K_1^{20}$ ) een kleinere waarde heeft dan voor de jaargemiddelde situatie van 1973. De berekende waarden voor  $K_1^{20}$  liggen in de range van 0,60 dag<sup>-1</sup> voor de trajekten benedenstrooms van de lozingen te Basel en Strassbourg en 0,19 dag<sup>-1</sup> voor de Nederlandse riviertakken.

#### Stikstofhuishouding

Evenals voor de zuurstofhuishouding zijn voor de procesparameters dezelfde waarden aangenomen, zoals deze uit de kalibratie (paragraaf 5.2) zijn afgeleid. Een uitzondering is gemaakt voor de (1<sup>e</sup> trap) nitrifikatiesnelheid ( $\beta_1^{20}$ ), die zoals is aangegeven in paragraaf 4.3, evenals de afbraakconstante van BOD-C ( $K_1^{20}$ ), wordt beïnvloed door de zuiveringsgraad van het afvalwater. Wolf [5] geeft aan dat voor gezuiverd afvalwater de nitrifikatiesnelheid ca. 3 x zo groot kan zijn. Deze verhoogde nitrifikatiesnelheid is een gevolg van de verhoogde concentraties aan nitrificerende bacteriën in het effluent van de zuiveringsinstallaties. Eenzelfde effect is waargenomen bij de sanering van de DSM-lozing op de Maas [8]. Hoewel het in principe mogelijk is  $\beta_1^{20}$  door het model te laten berekenen op basis van een soortgelijke relatie als voor  $K_1^{20}$ , is dit omwille van de eenvoud, vooralsnog niet gedaan en is voor de lozings-situatie 1977 een waarde voor  $\beta_1^{20}$  aangenomen van 0,20 dag<sup>-1</sup>. De voor de lozings-situatie van 1973 afgeleide waarde is door middel van kalibratie bepaald op 0,07 dag<sup>-1</sup> (paragraaf 5.2).

De berekeningsresultaten voor respectievelijk Kjeldahl-stikstof, ammonium, nitraat en totaal stikstof zijn weergegeven in de figuren 5.19 t/m 5.22. Evenals bij de simulaties voor 1973 is voor Kjeldahl-stikstof, en derhalve ook voor totaal-stikstof, alleen een vergelijk mogelijk met de gemeten waarden te Lobith en Kampen. Uit de toetsing van de berekeningsresultaten met de gemeten waterkwaliteit, op vooral de IRC-stations, kan worden afgeleid dat de eerste verifikatie van de modelberekeningen voor de stikstofhuishouding voldoende basis biedt voor verdere toepassingen van het model op andere situaties.

#### Fosfaathuishouding

De berekeningsresultaten van de jaargemiddelde simulatie voor 1977 zijn opgenomen in de figuren 5.23 en 5.24 voor respectievelijk ortho-fosfaat en totaal

fosfaat. De toetsing van de modelberekening aan de gemeten waterkwaliteit kan bevredigend worden genoemd, indien deze toetsing voornamelijk wordt betrokken op de IRC-stations. Voor de overige meetstations komen opmerkelijke verschillen voor bij totaal fosfaat. Deze verschillen zijn zo groot dat kan worden betwijfeld in hoeverre deze metingen van de Arge Rhein daadwerkelijk totaal fosfaat betreffen.

De resultaten van de verifikatie-berekeningen voor de Waal en Nederrijn/Lek zijn voor respektievelijk Gorinchem en Vreeswijk opgenomen in tabel 5.3, tezamen met de resultaten van Lobith en Kampen.

waterkwaliteits- variabele	Lobith		Kampen		Vreeswijk		Gorinchem	
	gem.	ber.	gem.	ber.	gem.	ber.	gem.	ber.
Q (m <sup>3</sup> /s)	2161	2221	-	344	-	362	-	1515
T (°C)	12,4	12,8	12,3	12,8	11,9	12,8	12,5	12,8
O <sub>2</sub> (g/m <sup>3</sup> )	7,1	7,0	7,5	7,3	8,5	8,5	7,8	7,1
BOD <sub>5</sub> (g/m <sup>3</sup> )	5,6	5,4	5,1	4,6	4,4	4,0	4,4	4,9
COD (g/m <sup>3</sup> )	27	26	26	25	26	23	25	25
Kjd-N (g/m <sup>3</sup> )	2,4	2,1	2,2	1,9	2,0	1,8	1,9	2,0
NH <sub>4</sub> -N (g/m <sup>3</sup> )	1,08	1,00	0,93	0,99	0,80	0,89	0,78	0,98
NO <sub>2</sub> -N (g/m <sup>3</sup> )	0,16	0,16	0,13	0,19	0,17	0,18	0,13	0,18
NO <sub>3</sub> -N (g/m <sup>3</sup> )	3,8	3,7	4,1	4,1	3,9	4,0	3,9	3,8
tot-N (g/m <sup>3</sup> )	6,2	5,8	6,4	6,1	6,0	5,7	5,7	5,8
ortho-P (g/m <sup>3</sup> )	0,40	0,33	0,38	0,37	0,32	0,33	0,37	0,33
tot-P (g/m <sup>3</sup> )	0,76	0,71	0,68	0,69	0,61	0,61	0,67	0,68
Chl-a (mg/m <sup>3</sup> )	37	36	44	35	38	35	43	35

Tabel 5.3 Gemeten en berekende waterkwaliteit te Lobith, Kampen, Vreeswijk en Gorinchem (jaargemiddelde 1977)

### Algen en detritus

Zoals reeds is opgemerkt in paragraaf 5.2 kan de modellering van algen en detritus min of meer worden beschouwd als een randvoorwaarde voor de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding. Op basis van de bij de kalibratie ingestelde waarden voor procesparameters is het verloop van algen gesimuleerd voor de jaargemiddelde kondities voor 1977 (figuur 5.25). Uit een vergelijking met de gemeten chlorofyl niveaus te Lobith en Kampen kan worden afgeleid dat de gesimuleerde algenbiomassa voor deze stations qua orde grootte vergelijkbaar is met deze gemeten niveau's.

De gesimuleerde hoeveelheid detritus is voor Lobith gelijk aan dat voor de simulatie van het jaargemiddelde van 1973 (paragraaf 5.2), hetgeen overeenkomt met 35  $\mu\text{g}$  eq. Chl-a/l.

### Samenvatting en discussie van de verificatie-resultaten

Bij de eerste verificatie van het model op het jaargemiddelde van 1977 is gebruik gemaakt van dezelfde invoergegevens voor de modelberekening, als bij de kalibratie op het jaargemiddelde van 1973, met uitzondering van de instromende debieten, temperaturen, alsmede de emissie door afvalwaterlozingen. De emissie, afkomstig van afvalwaterlozingen is op basis van de IRC inventarisatie voor 1977 berekend met het submodel EMIS, waarbij gebruik is gemaakt van dezelfde lozingshoeveelheden per i.e. (tabel 3.3), en dezelfde zuiveringsreduktiefactoren (tabel 3.4).

Voor zowel het kalibratie- als verificatie-jaar zijn met behulp van het verbeteringsprogramma DIFCON dezelfde achtergrondconcentraties aan het instromende water toegekend. Opgemerkt dient te worden dat vanwege verschillen in de debietverdeling tussen 1973 en 1977, de invloed van de diffuse bronnen op de concentraties te Lobith verschillend kan zijn.

Voor beide simulaties zijn dezelfde waarden voor de procesparameters gebruikt met uitzondering van de afbraakconstante voor BOD-C ( $K_1^{20}$ ) en de (1<sup>e</sup> trap) nitrifikatieconstante ( $\beta_1^{20}$ ), waarbij rekening is gehouden met de invloed van zuivering. De afbraakconstante voor BOD-C wordt op basis van de COD/BOD<sub>5</sub>-verhouding van het afvalwater door het model zelf aangepast. Voor de nitrifikatieconstante is deze aanpassing vooralsnog rechtstreeks uitgevoerd.

De resultaten van het model kunnen bevredigend tot goed worden genoemd, mede gelet op de nauwkeurigheid van de kwantificering van de emissie van afvalwaterlozingen en diffuse bronnen.

Opgemerkt dient te worden dat een gedetailleerdere kalibratie en verificatie van het model niet kan worden gerechtvaardigd, mede vanwege de beperkingen bij de toetsing van de berekeningsresultaten als gevolg van hiaten en inkonsistenties in het gemeten waterkwaliteitsbestand.

Desondanks kan worden gekonkludeerd dat de resultaten van de eerste verificatie-berekening, een goede basis biedt voor verdere toepassingen van het model.

#### 5.4 Modelresultaten van de maandgemiddelde simulaties van 1973 en 1977

Eén van de verdere toepassingen van het model betreft de maandgemiddelde simulaties voor het kalibratie-jaar 1973 en het verificatie-jaar 1977. Voor deze simulaties zijn dezelfde invoergegevens en procesparameters gebruikt als voor de berekening van de betreffende jaargemiddelden, met uitzondering van de instromende debieten, temperaturen, daglichtlengte en de seizoensafhankelijke achtergrondconcentraties (zie tabel 3.2).

Opgemerkt dient te worden dat iedere maandsimulatie een afzonderlijke steady-state simulatie betreft die onafhankelijk is van de voorgaande simulaties. Deze onafhankelijkheid tussen de maandsimulaties is gerechtvaardigd vanwege de beperkte verblijftijd (looptijd) van het gemodelleerde rivierstelsel (ca. 10 dagen).

Zoals reeds is opgemerkt in paragraaf 5.1 zal niet voor iedere maand worden voldaan aan de steady-state condities. Evenwel mag worden verwacht dat uit de berekeningsresultaten kan worden afgeleid welke beperkingen de toepasbaarheid van het model met zich meebrengt.

#### Randvoorwaarden

In figuur 5.26 zijn de gesimuleerde maandgemiddelde debieten te Lobith opgenomen voor 1973 en 1977. Opmerkelijk is de hoge afvoerperiode in februari 1977 (5000 m<sup>3</sup>/s) en de perioden met lage afvoer in januari en september 1973 en oktober 1977 (ca. 1000 m<sup>3</sup>/s).

In figuur 5.27 zijn de bij de modelberekening aangehouden maandgemiddelde temperaturen te Lobith uitgezet. Voor beide jaren is de maximale zomertemperatuur ca. 22°C en de minimale wintertemperatuur ca. 5°C.

#### Zuurstofhuishouding

De resultaten van de maandgemiddelde simulaties voor 1973 en 1977 voor de

komponenten van de zuurstofhuishouding zijn uitgezet in de figuren 5.28 t/m 5.30 voor respectievelijk zuurstof, BOD<sub>5</sub> en COD. De overeenkomst tussen de berekeningsresultaten en de wekelijkse metingen van zuurstof en BOD<sub>5</sub> en de 2-wekelijkse metingen van COD is beperkt. Vooral het gedrag van de gemeten BOD<sub>5</sub> en COD-gehalten is in vergelijking met de berekeningsresultaten vrij grillig en is voor een aantal perioden afwijkend van het gesimuleerde gedrag. Uit een nadere analyse van de simulatie-resultaten ten opzichte van de immissie-gegevens van andere meetstations, kan niet e nduidig worden afgeleid waardoor deze verschillen worden veroorzaakt. Evenwel dient te worden opgemerkt dat zowel BOD<sub>5</sub> als COD te beschouwen zijn als afgeleide waterkwaliteitsvariabelen, die niet als zodanig worden gemodelleerd. Met name de invloed van algen en detritus op het BOD<sub>5</sub> en COD-gehalte is in de zomerperiode een belangrijke faktor, die slechts op globale wijze kan worden gekwantificeerd. Daarnaast berust de omrekening van BOD<sub>∞</sub> in BOD<sub>5</sub> (zie par. 4.2) op een benadering van de afbraaksnelheid onder laboratoriumomstandigheden ( $K_{lab}^{20}$ ), die afhankelijk kan zijn van de aard (zuiveringsgraad e.d.) van het geanalyseerde water. E n en ander heeft tot gevolg dat een eventueel juiste kwantificering van het zuurstofverbruik in de rivier, geen garantie is voor een juiste kwantificering van het BOD<sub>5</sub>-gehalte, zoals dat onder laboratoriumkondities wordt bepaald.

De waarde die uit modelleringsoverwegingen aan het BOD<sub>5</sub>-gehalte kan worden toegekend is derhalve beperkt (zie tevens lit. [9], [10]).

#### Stikstofhuishouding

De resultaten van de maandgemiddelde simulaties voor 1973 en 1977 van de componenten van de stikstofhuishouding zijn opgenomen in de figuren 5.31 t/m 5.34. Ondanks verschillen tussen de berekende maandgemiddelden en de wekelijkse meetwaarden kan uit de figuren worden afgeleid dat het gesimuleerde gedrag van zowel Kjeldahl-, ammonium-, nitraat-, als totaal -stikstof vrij goed overeenkomt met het waargenomen gedrag van deze waterkwaliteitsvariabelen. Opmerkelijke afwijkingen in vergelijking met de gemeten waarden zijn de hoger berekende waarden voor Kjeldahl stikstof voor de zomerperiode van 1973 (fig. 5.31). Uit de simulatie-resultaten van ammonium (fig. 5.32) kan worden afgeleid dat de afwijkingen in het Kjeldahl stikstof voor deze periode het gevolg zijn van een te grote bijdrage van het organisch stikstof. Deze afwijking heeft tevens tot gevolg dat de berekende totaal stikstof concentraties voor deze periode eveneens te hoog zijn (fig. 5.34).



### Fosfaathuishouding

De resultaten van de maandgemiddelde simulaties voor 1973 en 1977 voor de componenten van de fosfaathuishouding zijn opgenomen in de figuren 5.35 en 5.36 voor respectievelijk ortho-fosfaat en totaal-fosfaat. Uit het vergelijk van de berekende maandgemiddelden en de wekelijks gemeten gehalten te Lobith kan worden afgeleid dat de simulatie van ortho-fosfaat goed overeenkomt met de meetresultaten. De simulatie van totaal-fosfaat is over het algemeen bevredigend met dien verstande dat tijdens afvoerpieken het totaal-fosfaat tijdelijk kan stijgen vermoedelijk als gevolg van een verhoogde uitspoeling en/of resuspensie, waarmee bij de modelberekening geen rekening is gehouden.

### Algen

De resultaten van de maandgemiddelde simulaties voor 1973 en 1977 voor algen zijn opgenomen in figuur 5.37.

Aangezien voor 1973 geen meetgegevens van algen beschikbaar zijn, beperkt de vergelijking tussen de berekende en gemeten algenconcentraties zich tot 1977. Rekening houdend met het eenvoudig concept van de algenmodellering kan uit deze vergelijking worden afgeleid dat de simulatie van algen vrij goed overeenkomt met de gemeten chlorofyl-gehalten.

### Samenvatting en discussie van de maandgemiddelde simulaties voor 1973 en 1977

Evenals voor de simulatie van het jaargemiddelde is voor de invoergegevens van het model geen gebruik gemaakt van de gemeten waterkwaliteit. De concentraties die worden berekend zijn gebaseerd op (1) jaargemiddelde emissiegegevens van afvalwaterlozingen (par. 3.4), (2) maandgemiddelde achtergrondconcentraties voor het instromende water (par. 3.3) (3) procesparameters zoals die voor de betreffende jaargemiddelde simulatie zijn gehanteerd (par. 5.2 en 5.3), (4) maandgemiddelde debieten, (5) maandgemiddelde temperaturen en (6) maandgemiddelde daglichtlengte.

Op basis van deze invoergegevens mag worden verwacht dat het model een min of meer gemiddeld waterkwaliteitsbeeld berekend, waarbij geen rekening wordt gehouden met het stochastische karakter van de emissie op het rivierstelsel en dynamische fluktuaties in het debiet en de temperatuur.

Simulaties met het model op basis van de aldus geformuleerde invoergegevens en vereenvoudigingen in het modelconcept, hebben tot gevolg dat het model onge-

schikt is voor het gedetailleerd simuleren van het dynamisch gedrag van de waterkwaliteit. Uit de resultaten van de maandgemiddelde simulaties kan evenwel worden afgeleid dat het model in staat is de concentratie-niveaus en de trends in deze niveaus onder veranderde afvoer- en seizoenscondities vrij goed te voorspellen.

Uit een vergelijking van de gemeten en gesimuleerde waterkwaliteit voor 1973 en 1977, kan worden afgeleid dat het model tevens in staat is de verandering in de emissie bijdrage door afvalwaterlozingen te 'vertalen' in een verandering van de concentratie-niveaus.

#### 5.5 Modelresultaten van de maandgemiddelde simulatie van 1972, 1973, 1974, 1976 en 1977

In aanvulling op de in paragraaf 5.3 beschouwde maandgemiddelde simulaties voor 1973 en 1977 is het model tevens toegepast op 1972, 1974 en 1976. Aangezien voor deze jaren de emissie-situatie niet eenduidig kan worden afgeleid uit de IRC-inventarisaties van 1973 en 1977 is voor de modelberekeningen voor 1972 en 1974 dezelfde emissie van afvalwaterlozingen aangehouden als voor 1973. Voor de modelberekening voor 1976 is de emissie-situatie van 1977 aangehouden. Evenals voor de maandgemiddelde simulaties van 1973 en 1977 is de emissie van afvalwaterlozingen konstant over het jaar verondersteld. Verder zijn dezelfde waarden voor de procesparameters, seizoenafhankelijke achtergrondconcentraties e.d. gebruikt als de in paragraaf 5.1 t/m 5.3 genoemde waarden voor de simulaties 1973 en 1977.

De enige invoergegevens van het model die specifiek zijn voor de betreffende maandsimulaties zijn derhalve de instromende debieten en de temperatuur.

Op basis van de bovengenoemde simplificaties en restricties m.b.t. de invoergegevens mag niet worden verwacht dat de waterkwaliteit in detail wordt gesimuleerd. Wel kan op deze wijze worden nagegaan in hoeverre de gesimuleerde concentratie niveaus en trendmatige veranderingen overeenkomen met de waargenomen waterkwaliteit.

#### Randvoorwaarden

In de figuur 5.38 is het verloop van de gesimuleerde maandgemiddelde afvoer en temperatuur te Lobith uitgezet voor de jaren 1972, 1973, 1974, 1976 en 1977. Opmerkelijk zijn de hoge afvoerpieken in november/december 1972, december 1974

en februari 1977. Karakteristieke laag-water perioden zijn de winter van 1972, oktober 1972 en de zomer en herfst van 1976.

De temperatuurvariaties zijn zoals mag worden verwacht zeer seizoensmatig met maxima tussen 20 en 25°C in de zomer en minima tussen 2 en 5°C in de winter.

#### Zuurstofhuishouding

De berekeningsresultaten voor de jaren 1972, 1973, 1974, 1976 en 1977 zijn tesamen met de meetresultaten van Braubach, Lobith, Gorinchem en Kampen opgenomen in de figuren 5.39, 5.40 en 5.41 voor resp. zuurstof,  $BOD_5^{20}$  en COD. Uit de figuren kan worden afgeleid dat de berekende zuurstofgehalten voor het droge jaar 1976 te hoog zijn in vergelijking met de metingen op de verschillende stations. Eén van de mogelijke oorzaken kan worden gezocht in de nog niet voltooide saneringsmaatregelen ten opzichte van de gehanteerde lozingssituatie 1977. De in vergelijking met de meetgegevens lage waarden van de berekende BOD-gehalten voor deze perioden lijken dit te bevestigen. De vergelijkbaarheid van de COD-simulatie laat duidelijk te wensen over.

#### Stikstofhuishouding

Aangezien op het station Braubach Kjeldahl stikstof niet tot het analysepakket behoort is voor dit station geen vergelijking met de berekeningsresultaten van Kjeldahl en totaal stikstof mogelijk. Uit de figuren 5.42 en 5.44 kan worden afgeleid dat de resultaten voor Kjeldahl en ammonium-stikstof over het algemeen vrij goed overeenkomen met de gemeten gehalten. De nitraat berekeningen voor de droge perioden resulteren over het algemeen in te hoge concentraties, hetgeen een gevolg kan zijn van (1) een te grote bijdrage van de nitraatbelasting vanuit afvalwaterlozingen (2) een lager 'natuurlijk' gehalte van het toestromende water bij lage afvoerkondities of (3) een grotere invloed van het denitrifikatieproces. Deze laatste afwijkingen hebben tot gevolg dat in deze perioden ook de berekening van totaal stikstof afwijkt van de gemeten gehalten.

#### Fosfaathuishouding

Uit de figuren 5.46 en 5.47 kan worden afgeleid dat de berekeningsresultaten voor ortho- en totaal-fosfaat vrij goed overeenkomen met de waargenomen gehalten. Voor de droge perioden (oktober 1972, 1976) zijn de berekende totaal-

fosfaat gehalten te hoog hetgeen mogelijk kan worden toegeschreven aan een verhoogde sedimentatie van particulier en organisch P in deze periode.

### Algen

Een vergelijking van de gemeten en berekende algenconcentraties is alleen mogelijk voor 1977 voor de nederlandse meetstations. Rekening houdend met de eenvoudige wijze waarop de berekening van algen wordt uitgevoerd is de overeenkomst met de gemeten gehalten bevredigend te noemen (figuur 5.48).

### Samenvatting en discussie van de maandgemiddelde simulaties voor

#### 1972, 1973, 1974, 1976 en 1977

Uit de simulaties kan worden afgeleid dat het model vrij goed in staat is de concentratie-niveaus en trendmatige veranderingen van Kjeldahl-stikstof, ammonium, ortho-fosfaat en totaal-fosfaat te berekenen. Dit geldt in wat mindere mate voor zuurstof,  $BOD_5^{20}$ , COD en nitraat.

Uit de perioden met lage afvoer kan worden afgeleid dat de berekende zuurstof- en nitraatgehalten voor deze periode veelal te hoog zijn. Aangezien over het algemeen zowel de zuurstof- als nitraatgehalten van het grondwater een lager zijn dan van '(sub) surface runoff', kan het relatief grotere aandeel grondwatertoestroming in de droge perioden één van de mogelijke oorzaken zijn.

De resultaten van  $BOD_5^{20}$  en COD zijn vrij grillig hetgeen een gevolg zou kunnen zijn van resuspensie en sedimentatie processen in de rivier, of wel een meer tijdsafhankelijke (droog/nat weer) belasting door afvalwaterlozingen. In dit verband kunnen tevens de neerslag afhankelijke variaties in de concentraties van runoff worden genoemd die niet in de modelberekening worden beschouwd.

#### 5.6 Modelsimulatie van het 'fliessende Welle' onderzoek 1974

Eén van de belangrijkste factoren waardoor de nauwkeurigheid van de modelberekeningen wordt beperkt is de onzekerheid van de lozingsgegevens. Het is derhalve interessant om na te gaan of afwijkingen in de modelsituaties een gevolg zijn van enkele foutief ingeschatte afvalwaterlozingen, danwel een foutieve inschatting van de invloed van diffuse bronnen en/of processen.

Aangezien het in 1974 door de IRC uitgevoerde 'fliessende Welle' onderzoek [1] een indruk geeft van de invloed van de belasting op de Rijn en Waal vanuit afvalwaterlozingen en zijrivieren, is voor deze periode tevens een modelsimu-

latie uitgevoerd.

In de figuren 5.49 t/m 5.53 is voor resp. zuurstof,  $BOD_5^{20}$ , ammonium, nitraat en orthofosfaat zowel het berekeningsresultaat voor de periode juni/juli 1974 opgenomen als de meetresultaten van het gedurende de periode 24 juni-1 juli uitgevoerde 'fliessende Welle' onderzoek.

Overeenkomsten tussen de modelsimulatie en de waargenomen waterkwaliteit betreffen voor het zuurstofgehalte (fig. 5.49) de sterke dalingen op 430 km en de daling op 800 km. Aangezien het zuurstofgehalte in nauwe relatie staat met het zuurstofverbruik, waarvan het  $BOD_5^{20}$  een belangrijke indikator is, kan de afname van het zuurstofgehalte worden gerelateerd aan de  $BOD_5^{20}$  toenames op deze kilometrages (fig. 5.50). Uit tabel 3.1 kan worden afgeleid dat deze gemiddelde toenames een gevolg zijn van puntinstromingen en afvalwaterlozingen als de Neckar, BASF en Waldhof (430 km) en de Emscher (790 km). Opmerkelijke verschillen zijn de waargenomen sterke zuurstof-daling tussen 200-250 km en de berekende  $BOD_5^{20}$  toename op het traject 200-350 km.

Uit deze verschillen zou mogelijk kunnen worden afgeleid dat de afbraak op dit traject groter is dan voor de berekeningen is aangehouden.

De berekende lozingen op 300 km (Cellulose Strassbourg en Strassbourg), die op basis van de IRC-inventarisaties zijn bepaald, blijken niet uit het 'fliessende Welle' onderzoek.

Overeenkomsten voor het ammoniumgehalte (fig. 5.51) zijn de sterke toenames op 430 km (Neckar, BASF), 500 km (Main), 690-710 km (Köln, Wupper, Bayer) en 790-810 km (Emscher, Lippe). Verschillen zijn evenals voor  $BOD_5^{20}$  een te sterke toename van het berekende ammonium-gehalte over het traject 200-400 km.

Voor nitraat (fig. 5.52) lijkt de berekende toename op 430 km (Neckar, BASF) en 500 km (Main) te groot, terwijl de toename op 600 km (Moezel) te gering is. Mogelijk is de geringere nitraat-belasting vanuit de Main en de afname van het nitraat-gehalte tussen 430 km en 590 km een gevolg van een verhoogd denitrificatieproces (lage zuurstofgehalten).

Het gemeten ortho-fosfaat (fig. 5.53) toont een opmerkelijke toename tussen 680 en 710 km (Köln, Wupper, Bayer). Deze toename wordt evenwel volledig teniet gedaan door een sterke afname tussen 730 en 750 km. Gezien de sterke toename van het ijzergehalte over het traject 700-800 km mag worden verwacht dat coagulatie van ortho-fosfaat met ijzer plaatsvindt. Dit effect is tevens in de modelberekening opgenomen door middel van een verhoogde overgang van ortho-fosfaat naar partikulair fosfaat op dit traject.

Samenvattend kan uit de vergelijking van het berekende concentratie-verloop tijdens het 'fliessende Welle' onderzoek worden opgemaakt, dat met uitzondering van enkele lozingen tussen 200 en 300 km de berekende concentratie-veranderingen als zodanig zijn waargenomen. Een nauwkeurig vergelijk van de gemeten en berekende concentratie is echter niet goed mogelijk, enerzijds vanwege hydrologische (debiet) verschillen, anderzijds vanwege het momentane karakter van het 'fliessende Welle' onderzoek.

### 5.7 Gevoeligheidsonderzoek

Het gevoeligheidsonderzoek heeft zich in hoofdzaak gericht op het kwantificeren van de invloed op de berekeningsresultaten van factoren als, (1) de emissie van afvalwaterlozingen, (2) de emissie van diffuse bronnen, (3) waterkwaliteitsprocessen, (4) algen, (5) hydrologie en (6) temperatuur.

Het onderzoek is vooral betrokken op de situatie van 1977, enerzijds vanwege de meer actuele lozingssituatie, anderzijds vanwege de hydrologie die nauw overeenkomt met het langjarig gemiddelde.

#### Invloed van emissie van afvalwaterlozingen en diffuse bronnen

In het kader van het gevoeligheidsonderzoek is voor de jaargemiddelde simulatie van 1977 nagegaan hoe groot het aandeel is van afvalwaterlozingen ten opzichte van de diffuse lozingen. Hiertoe is een modelberekening uitgevoerd, waarbij de emissiebijdrage van afvalwaterlozingen is weggelaten. De aldus berekende concentraties zijn vergeleken met de oorspronkelijk berekende concentraties. Uit deze vergelijking kan worden afgeleid dat het aandeel van afvalwaterlozingen in de berekende concentraties te Lobith per waterkwaliteitsvariabele sterk kan verschillen (tabel 5.4).

Opgemerkt dient te worden dat het aandeel van de afvalwaterlozingen en dat van diffuse bronnen in de concentraties te Lobith in het algemeen afhankelijk is van zowel hydrologische als seizoensmatige omstandigheden. In het kader van de simulaties met het waterkwaliteitsmodel (rapport R1056-VIII) wordt deze invloed nader belicht in relatie tot de mogelijkheden voor sanering van de Rijn.

#### Invloed van zuivering van afvalwaterlozingen en waterkwaliteitsprocessen

De invloed van de zuivering van afvalwaterlozingen op de kwaliteit van het ontvangende water is niet bestudeerd als onderdeel van het gevoeligheidsonder-

zoek met betrekking tot de berekeningsresultaten met MODQUAL. Wel is bij de berekening van de netto belasting door afvalwaterlozingen op de Rijn de grootte van het 'overall' zuiveringsrendement bepaald (rapport R1056-VI). Deze waarden zijn opgenomen in tabel 5.4.

Het ligt voor de hand dat voor stoffen, die voornamelijk afkomstig zijn van afvalwaterlozingen, de berekeningsresultaten vrij gevoelig zijn voor de grootte van het zuiveringsrendement.

De invloed van waterkwaliteitsprocessen is bepaald door middel van het berekenen van de concentratie te Lobith op basis van de totale belasting (afvalwater + diffuse bronnen) op de Rijn en het vergelijken van deze concentraties met de oorspronkelijk berekende concentraties.

De resultaten van de aldus bepaalde concentratieverandering ten gevolge van de beschouwde waterkwaliteitsprocessen is eveneens opgenomen in tabel 5.4.

Uit deze tabel kan worden afgeleid dat van de lozings situatie 1977 de invloed van zuivering groter is dan de invloed van de processen in het oppervlaktewater. Deze processen zijn evenwel een niet te verwaarlozen aanvullen op de invloed van zuivering.

	invloed van zuivering op de belasting vanuit afvalwaterlozingen	aandeel van afvalwater- lozingen in de bere- kende concentraties te Lobith	invloed van processen op de berekende kon- centraties te Lobith
BOD <sub>5</sub>	-67%	61%	-51%
COD	-58%	65%	-26%
Kjd-N	-59%	66%	-28%
NH <sub>4</sub> -N	-53%	87%	-15%
NO <sub>2</sub> -N	-	87%	+100%
NO <sub>3</sub> -N	+93%	50%	+9%
tot-N	-30%	56%	-7%
ortho-P	-12%	88%	-28%
totaal-P	-32%	77%	-16%

Tabel 5.4 Overzicht gevoeligheidsonderzoek voor Lobith (jaargemiddelde 1977)

In de figuren 5.54 t/m 5.56 is de invloed van afvalwaterlozingen en processen in het oppervlaktewater op de berekeningsresultaten weergegeven voor het traject Stein-Kampen (jaargemiddelde 1977).

Bij de simulatie zonder processen is voor het zuurstofgehalte de verzadigingswaarde opgenomen.

#### Invloed van algen

De invloed van algen is sterk seizoensmatig, hetgeen is geïllustreerd in de figuren 5.57 en 5.58 voor respectievelijk zuurstof, BOD, COD, Kj-d-N en  $\text{NH}_4\text{-N}$ . Uit figuur 5.57 kan worden afgeleid dat de invloed van de netto zuurstofproductie door algengroei een duidelijk additionele bijdrage levert aan de zuurstofhuishouding (in de zomerperiode ca. 2-3  $\text{mgO}_2/\text{l}$ ). Uit de figuren blijkt dat ca. 50% van het berekende BOD-gehalte en ca. 30% van het berekende COD-gehalte het gevolg van de aanwezigheid van algen kan zijn.

De invloed van algen op de stikstofhuishouding is duidelijk merkbaar door een groter organisch aandeel. Als gevolg van de opname van ammonium door algen geeft de simulatie zonder algen een hoger ammoniumgehalte. Voor Kjeldahlstikstof (organisch + ammonium stikstof) resulteert de simulatie zonder algen in een lager gehalte, waarbij de netto algeninvloed maximaal ca. 25% bedraagt (fig. 5.58).

#### Invloed van hydrologie (afvoerregiem)

De invloed van hydrologie op de berekeningsresultaten is gekwantificeerd door middel van 2 simulaties, waarbij het de debieten in het gehele rivierstelsel zijn verdubbeld respectievelijk gehalveerd ten opzichte van het jaargemiddelde van 1977. Enkele resultaten van deze simulaties zijn voor het traject Stein-Kampen opgenomen in de figuren 5.59 t/m 5.61.

Het debiet beïnvloedt de concentraties in een rivier door middel van (1) een verandering in de verdunningscapaciteit en (2) een verandering van de stroomsnelheid en diepte. Tevens beïnvloedt de debietverdeling (3) de achtergrondconcentratie (bijdrage diffuse bronnen).

Afhankelijk van de herkomst (afvalwaterlozingen, diffuse bronnen) zal de invloed van een verandering in de verdunningscapaciteit vooral groot zijn voor stoffen die voornamelijk afkomstig zijn van afvalwaterlozingen.

De invloed van een verandering van de stroomsnelheid (looptijd) en diepte zal groot zijn voor stoffen die in sterke mate worden beïnvloed door processen in



het oppervlaktewater. Zowel vanwege veranderingen in de duur (looptijd), waarover het proces werkzaam is en de eventuele diepte-afhankelijkheid van het proces (bijv. reaeratie), zal de invloed van processen bij een verandering van het afvoerregiem zich sterk kunnen wijzigen.

Opgemerkt dient te worden dat het effect van de verandering in de verdunningskapaciteit en het effect van de verandering in de invloed van processen (bijv. afbraak), elkaar gedeeltelijk kan compenseren.

Voor de zuurstofhuishouding (fig. 5.59) overheerst over het traject 200-500 km de invloed van de verdunningskapaciteit, waardoor een hoger  $BOD_5^{20}$ -gehalte bij lagere debieten, tezamen met de vergrootte invloed van het afbraakproces, niet wordt gekompenseerd door de grotere invloed van het reaeratieproces. Meer benedenstrooms overheerst voor lagere debieten de grotere invloed van reaeratie (geringere diepte, langere looptijd).

Voor Kjeldahl-stikstof (fig. 5.60) overheerst evenals voor  $BOD_5^{20}$  de invloed van de verandering in de verdunningskapaciteit boven de veranderde invloed van het afbraak en sedimentatieproces. Voor nitraat wordt het effect van een geringere verdunning bij lagere debieten versterkt door de grotere invloed van het nitrifikatieproces, waarbij nitraat wordt gevormd.

De invloed van het afvoerregiem op het gedrag van ortho-fosfaat en totaal-fosfaat (fig. 5.61) wordt overheerst door de verandering in de verdunningskapaciteit.

#### Invloed van temperatuur

De invloed van temperatuur op de simulatieresultaten is direkt gekoppeld aan de invloed van processen op de verschillende waterkwaliteitsvariabelen. Voor stoffen die in sterke mate worden beïnvloed door processen zal over het algemeen de invloed van de temperatuur (bijv. zuurstof, BOD) groter zijn. In de figuren 5.62 en 5.63 zijn voor respectievelijk zuurstof, BOD, ammonium en nitraat de berekeningsresultaten opgenomen van de simulaties met een verhoogde temperatuur (+5°C en +10°C) ten opzichte van het jaargemiddelde van 1977.

Uit deze figuren blijkt dat behoudens voor zuurstof de invloed van temperatuur beperkt is.

#### 5.8 Invloed van middeling in de tijd

In bijlage II is nader ingegaan op de konsekwenties van de steady-state aanname. Uit deze bijlage kan worden afgeleid dat als gevolg van het toepassen van

middelingsprocedures extra termen ontstaan in de differentiaalvergelijkingen waarmee de concentratieveranderingen worden beschreven.

Het verwaarlozen van deze extra termen die in het algemeen niet kwantificeerbaar zijn, kan leiden tot afwijkingen van de berekende waarden ten opzichte van de gemeten waarden. Deze afwijkingen zijn voornamelijk het gevolg van (1) variaties in lozingen, (2) variaties in het afvoerregiem en (3) variaties in de temperatuur, in samenhang met de niet-lineariteit van de modeloplossing.

Door middel van een vergelijking van bijvoorbeeld het resultaat van een jaargemiddelde berekening (par. 5.2 en 5.3) met het gemiddelde van de resultaten van de maandgemiddelde berekeningen (par. 5.4) voor dat jaar kunnen deze afwijkingen op eenvoudige wijze zichtbaar worden gemaakt. De resultaten van de aldus bepaalde jaargemiddelden voor 1973 en 1977 zijn vermeld in tabel 5.5.

	1973		1977	
	(a)	(b)	(a)	(b)
O <sub>2</sub>	4,8	5,4	7,0	7,5
BOD <sub>5</sub> <sup>20</sup>	8,0	8,6	5,4	5,8
WBOD	5,9	6,1	3,3	3,4
COD	38	40	26	28
Kjd-N	4,1	4,2	2,1	2,1
NH <sub>4</sub> -N	2,5	2,5	1,00	1,00
NO <sub>2</sub> -N	0,11	0,11	0,16	0,15
NO <sub>3</sub> -N	2,9	2,9	3,7	3,8
tot-N	7,0	7,1	5,8	5,9
ortho-P	0,34	0,34	0,33	0,33
tot-P	0,84	0,86	0,71	0,74
Chl-a	40	44	36	40
det. (≠q Chl-a)	35	40	35	40

Tabel 5.5 Berekeningsresultaten voor Lobith (jaargemiddelde 1973 en 1977) op basis van jaargemiddelde invoergegevens (a) en maandgemiddelde invoergegevens (b)

Uit de procentuele afwijkingen kan worden afgeleid dat de onderlinge verschillen over het algemeen gering zijn. Hieruit mag worden afgeleid dat ondanks sterke debiet en temperatuurveranderingen binnen een jaar, de berekeningen op basis van jaargemiddelde invoergegevens geen onaanvaardbare afwijkingen opleveren.

## 6 Konklusies en Diskussie

### Algemeen

De opbouw van het waterkwaliteitsmodel Rijn omvat naast het toepassen van een bestaand waterkwaliteitsmodel voor rivieren op het rivierstelsel van de Rijn, tevens de algehele organisatie van gegevensopslag, gegevensverwerking en de ontwikkeling van submodellen en verwerkingsprogrammatuur (o.a. EMIS, AFVOER, DIFCON, IMMIS, PLOT).

In een vroeg stadium van de ontwikkeling van het Rijn- (en Maas-)model is het nodig gebleken het oorspronkelijk riviermodel QUAL-II, op diverse onderdelen te modificeren en uit te breiden met modules voor een afzonderlijke berekening van organisch stikstof en ammonium, van ortho-fosfaat en particulier en organisch fosfor, alsmede een module voor de modellering van het chemisch zuurstofverbruik (COD).

Het aldus ontstane waterkwaliteitsmodel MODQUAL heeft vervolgens centraal gestaan bij het totale programmapakket zoals dat uiteindelijk voor het waterkwaliteitsmodel Rijn is opgebouwd.

Enerzijds vanwege de doelstelling van het projekt, het leveren van de toekomstige randvoorwaarden voor de semi-stagnante wateren in Nederland die hoofdzakelijk met Rijnwater worden gevoed (o.a. IJsselmeer, Noordelijk Deltabekken), en anderzijds vanwege de beperkingen in het beschikbare gegevensbestand, is niet getracht het dynamisch gedrag van de waterkwaliteit in detail te voorspellen.

De eerste toepassingen van het model (o.a. de kalibratie op 1973) betroffen jaargemiddelde omstandigheden, waarbij hoofdzakelijk het verloop van de berekende concentraties in de Rijn over het traject vanaf Stein tot Lobith/Kampen nader is bestudeerd in relatie tot de jaargemiddelden van de lokale waterkwaliteitsmetingen. Het op deze wijze veronachtzamen van het dynamisch gedrag van de omstandigheden (o.a. afvoer, temperatuur) in de Rijn is aan een nader onderzoek onderworpen, waarbij is geconstateerd dat met uitzondering van hoge afvoergolven over een korte periode, de op deze wijze toegepaste steady-state benadering geen aanleiding geeft tot onaanvaardbare afwijkingen in de berekende concentratieniveaus.

kalibratie en verifikatie (resp. jaargemiddelde 1973 en 1977)

De kalibratie van het model heeft hoofdzakelijk plaatsgevonden via een bijstelling van de procesparameters binnen de ranges van de literatuur.

Getracht is zoveel mogelijk gebruik te maken van een set procesparameters voor het gehele rivierstelsel. Uitzonderingen zijn echter noodzakelijk gebleken voor o.a. de sedimentatiesnelheid in stuwpannen, de extra coagulatie van ortho-fosfaat en ijzer in het Ruhrgebied, en de verhoogde denitrifikatie in het benedenstroomse traject van de Main.

Over het algemeen kan uit de berekeningsresultaten worden afgeleid dat de kalibratie en verifikatie van het model bevredigend is verlopen.

Mede gelet op de nauwkeurigheid van de kwantificering van met name de emissie van afvalwaterlozingen en belasting vanuit diffuse bronnen kan een gedetailleerdere kalibratie en verifikatie niet worden gerechtvaardigd.

maandgemiddelde simulaties

Voor de periode 1972-1977 (behalve 1975) is per maand een berekening uitgevoerd, waarbij voor 1972-1974 de lozingssituatie is gebaseerd op een inventarisatie van 1973, terwijl voor 1976 en 1977 de lozingssituatie is gebaseerd op een inventarisatie van 1977.

Ondanks deze vrij grove inschatting van de lozingssituatie kan uit de simulatieresultaten worden afgeleid dat het model goed in staat is de concentratieniveau's en de trendmatige verandering daarin als gevolg van gewijzigde hydrologische en seizoensmatige omstandigheden, te berekenen.

Dit geldt met name voor opgeloste stoffen die voornamelijk afkomstig zijn van afvalwaterlozingen zoals ammonium en ortho-fosfaat. Het gedrag van de concentraties van deze stoffen wordt in belangrijke mate bepaald door de veranderingen in de verdunningscapaciteit van de rivier bij veranderingen in het afvoerregiem.

Voor stoffen die gedeeltelijk sedimenteerbaar zijn (o.a. BOD, COD, Kjeldahl-N, totaal-P) vertoont het gemeten waterkwaliteitsverloop over het algemeen een grilliger karakter waardoor de vergelijking met de berekeningsresultaten wordt bemoeilijkt. Dit grillige karakter kan het gevolg zijn van een wisselwerking tussen sedimentatie en resuspensie, terwijl ook de belasting vanuit diffuse bronnen of rioolstelsels sterk afhankelijk kan zijn van de fluktuaties in de hydrologische condities.

Seizoensmatige concentratieveranderingen zijn duidelijk waarneembaar voor zuurstof,  $BOD_5^{20}$ , Kj-d-N en  $NH_4-N$ . Dit is enerzijds het gevolg van temperatuurafhankelijke processen, anderzijds dragen ook seizoensvariaties in de belasting vanuit diffuse bronnen bij tot deze concentratieveranderingen.

Voor  $BOD_5^{20}$  komen de hoogste waarden voor in de zomerperiode, terwijl op basis van de verhoogde invloed van het afbraakproces in deze periode juist de laagste waarden zouden worden verwacht. De oorzaak van dit tegengestelde gedrag is het gevolg van de bijdrage van algen tot het  $BOD_5^{20}$ -gehalte.

Voor situaties waarin door saneringsmaatregelen de direkte bijdrage van afvalwaterlozingen aan het  $BOD_5^{20}$ -gehalte steeds verder wordt teruggedrongen mag worden verwacht dat het  $BOD_5^{20}$ -gehalte naar verhouding weinig zal afnemen, vanwege het niet te verwaarlozen aandeel van algen in deze waterkwaliteitsvariabele.

#### Evaluatie en toepasbaarheid van het model

Uit de toepassingen van het waterkwaliteitsmodel op zowel jaargemiddelde als maandgemiddelde basis voor de periode 1972-1977, kan worden afgeleid dat het model over het algemeen vrij goed in staat is de concentratieniveaus in het stroomgebied van de Rijn te voorspellen onder verschillende hydrologische en seizoensmatige kondities. Tevens kan uit een vergelijking van de simulatiere resultaten van 1973 en 1977 worden afgeleid dat het model in staat is de gevolgen van veranderingen in de lozings situatie te kwantificeren.

Voor de ontwikkeling van het waterkwaliteitsmodel is gebruik gemaakt van vrij algemeen ter beschikking staande informatie. Zo zijn de emissiegegevens van afvalwaterlozingen afgeleid uit inventarisaties van de Internationale Rijncommissie (IRC), waarbij de belasting per inwoner eenheid/ekwivalent en de invloed van zuivering is ingeschat op basis van ter beschikking staande literatuur en informatie aanwezig bij het Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater (RIZA). Het is echter niet ondenkbaar dat na verloop van tijd en mogelijk mede gebaseerd op het expliciet etaleren van de huidige modelaannamen en resultaten, meer gedetailleerde informatie ter beschikking komt. Voor toepassingen van het model op langere termijn verdient het derhalve aanbeveling om de modelaannamen en invoergegevens te evalueren en zonodig bij te stellen aan de hand van nieuw beschikbaar gekomen gegevens.

In dit verband kan worden opgemerkt dat de modelopzet zodanig is dat wijzigingen over het algemeen op eenvoudige wijze kunnen worden aangebracht en uitgetest.

Met de ontwikkeling van het waterkwaliteitsmodel Rijn is een instrumentarium beschikbaar gekomen, waarmee de waterkwaliteit van de Rijn kan worden bestudeerd in relatie tot (1) de belasting met verontreinigende stoffen afkomstig van afvalwaterlozingen en diffuse bronnen, (2) hydrologische-, (3) thermische- en (4) seizoensmatige omstandigheden.

Met het model kan derhalve de invloed van voorgenomen beleids- en beheersmaatregelen worden gekwantificeerd onder diverse hydrologische en seizoensmatige condities.

Dit betreft o.a.

- de invloed van zuiveringsmaatregelen en andere te verwachten ontwikkelingen in de lozingssituatie
- de invloed van specifieke maatregelen voor stikstof-redukatie
- de invloed van specifieke maatregelen voor fosfaat-redukatie
- de invloed van thermische verontreinigingen
- enz..

In het rapport R1056-VIII 'Simulatie met het waterkwaliteitsmodel Rijn' wordt hieraan nader aandacht besteed.

Hoewel het huidige waterkwaliteitsmodel vooral is ontwikkeld ten behoeve van de modellering van de zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding kan het model tevens een belangrijke basis zijn voor de bestudering van andere waterkwaliteitsaspecten. Zo is het model reeds toegepast in het kader van een onderzoek naar de te verwachten concentratieniveaus aan polyfosfaatvervangende stoffen (zoals NTA, CMOS, CITREX, NAS), indien zou worden besloten tot een algehele invoering van fosfaatloze (arme) wasmiddelen (lit. 11, 12).

Andere toepassingsmogelijkheden betreffen het leveren van toekomstige randvoorwaarden voor studies zoals:

- bestudering van de te verwachten waterkwaliteit in de toekomstige zoete Delta-wateren (Zoommeer, Grevelingen)
- sanering IJsselmeer
- waterkwaliteit Rijnland
- Policy Analysis for Watermanagement of the Netherlands (PAWN)
- waterkwaliteitsplannen.

Tevens zou het model kunnen worden gebruikt voor de bestudering van stoffen als:

- zout
- organische microverontreinigingen
- zware metalen
- enz..

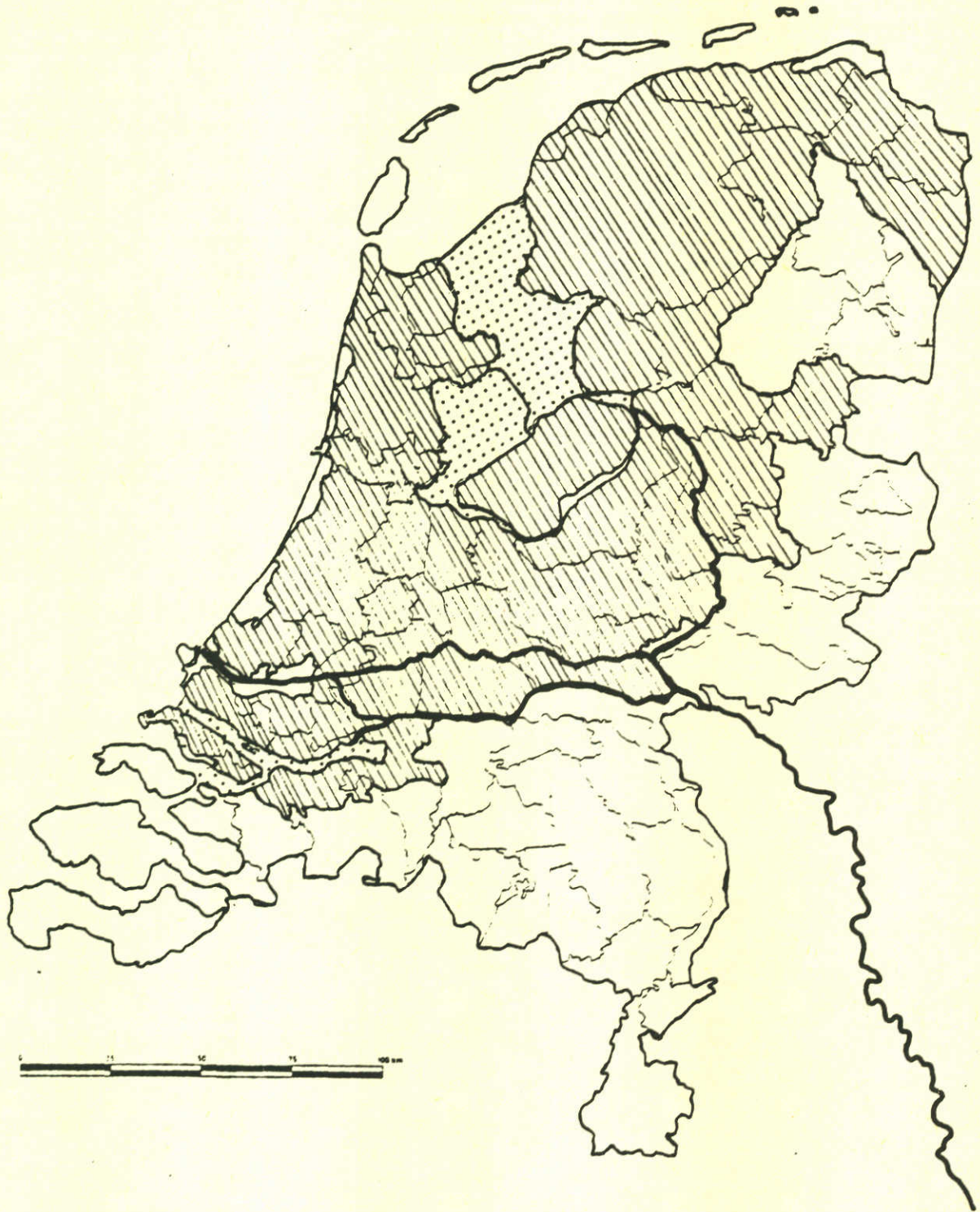
## LITERATUUR

- 1 Internationale Kommission zum Schutze des Rheins gegen Verunreinigung, Langfristiges Arbeitsprogram, Koblenz, 1974
- 2 IMHOFF, K., Taschenbuch der Stadtentwässerung 23, verb. auflage, Muchen, 1972
- 3 ESSER, W., Reaktionskinetische Untersuchung der selbstreinigungsvorgänge in Fließgewässern, Dissertation, TH Darmstadt, 1977
- 4 O'CONNOR, D.J. and DOBBINS, W.E., Mechanism of reaeration in natural streams, Trans. ASCE, 123, 1958
- 5 WOLF, P. Simulation des Sauerstoffhaushalts in Fließgewässern, Dissertation, TU Stuttgart, 1974
- 6 STEHFEST, H., Model-theoretische Untersuchungen zur Selbstreinigung von Fließgewässern, Kernforschungszentrum, Karlsruhe, 1973
- 7 NORTON, W.R., ROESNER, L.A., EVERSON, D.E. and MONSER, J.R., Computer Program Documentation for Stream Water Quality Model, QUAL-II, Water Resource Engineers, 1974
- 8 Waterloopkundig Laboratorium, Waterkwaliteitsmodel Maas, Kalibraties en verifikaties, R 1463-III/S 321-V, 1981
- 9 WILDERER, P., ENGELMANN, G. and SCHMENGER, H., Kritik am BSB<sub>5</sub> als Verschmertzungsparameter, Gwf-wasser/Abwasser, 118, heft 8, 1977
- 10 STRALEN, M. van and KERSTING, K., De BOD<sub>5</sub><sup>20</sup>-test, een onbruikbare maatstaf voor de bepaling van de kwaliteit van oppervlaktewater, H<sub>2</sub>O (10), 1977, nr. 14
- 11 Waterloopkundig Laboratorium, Polyfosfaatvervangende stoffen in het stroomgebied van de Rijn, rapport R 1462, Delft, 1979



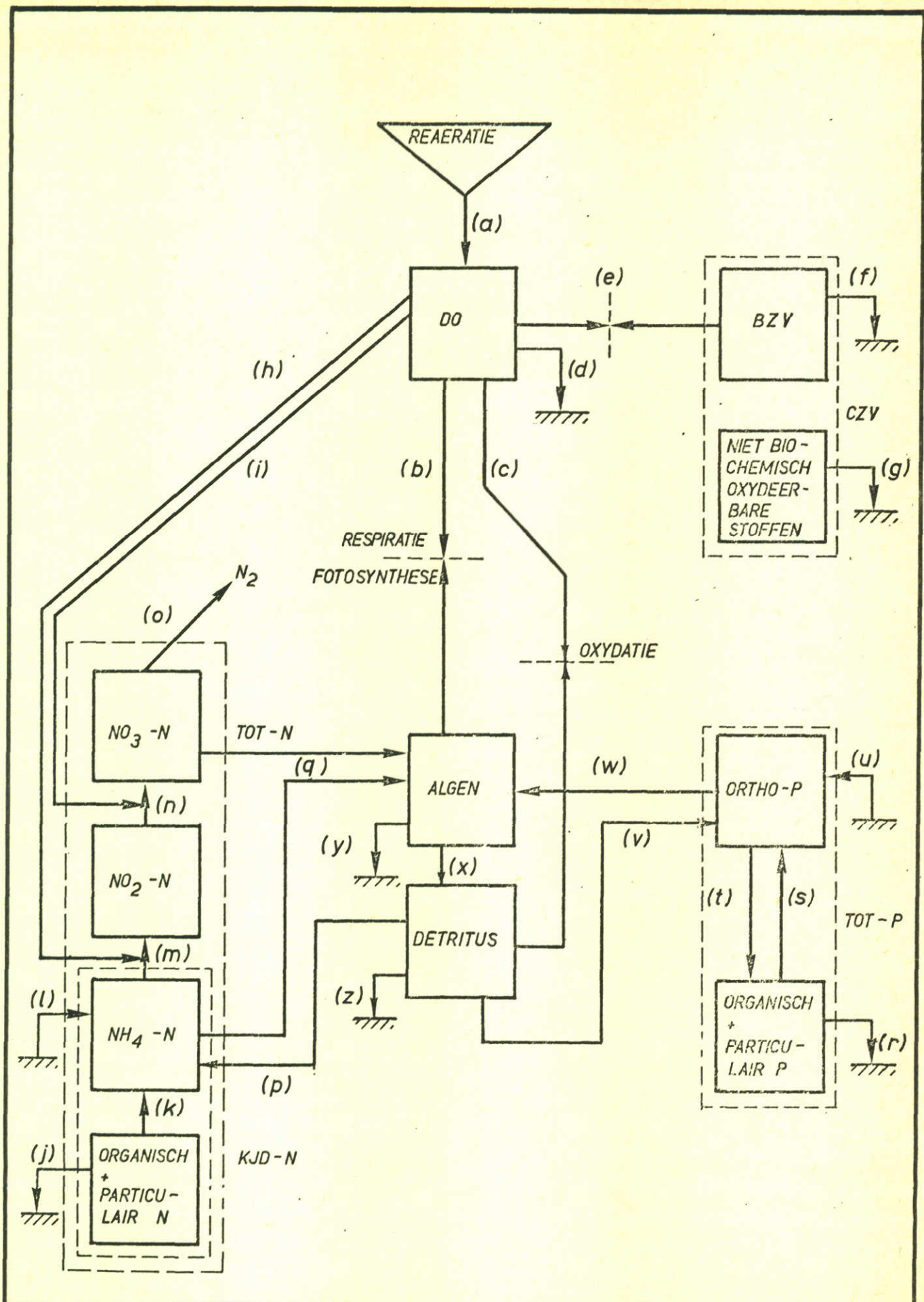
LITERATUUR

- 12 SALOMONS, W. and PAGEE, J.A. van, Prediction of NTA levels in river-systems and their effect on metal concentrations, International Conference, Heavy Metals in the Environment, Amsterdam, 1981 (p. 694-697)

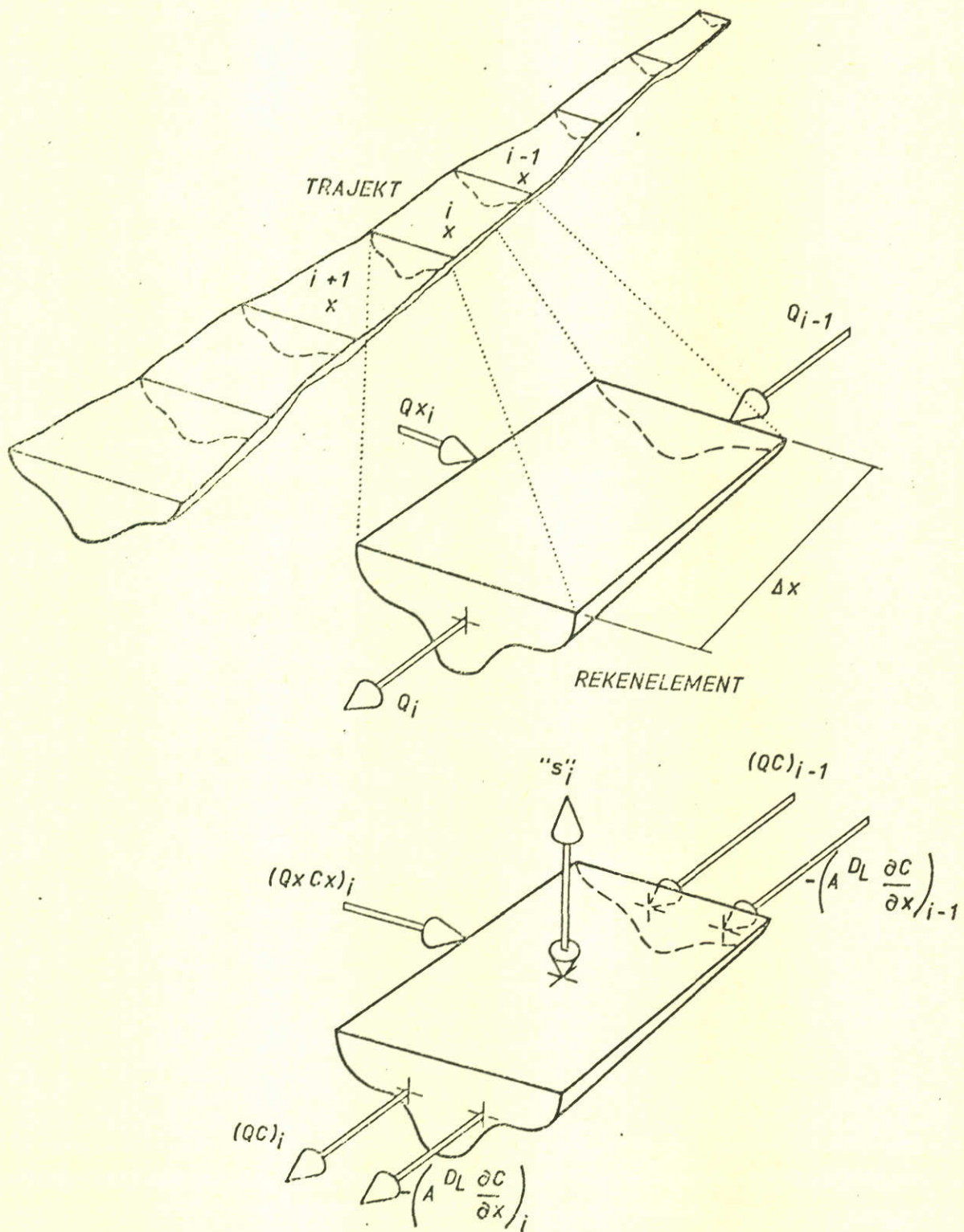


Globaal overzicht van de gebieden in Nederland welke in enigerlei mate met Rijnwater worden gevoed

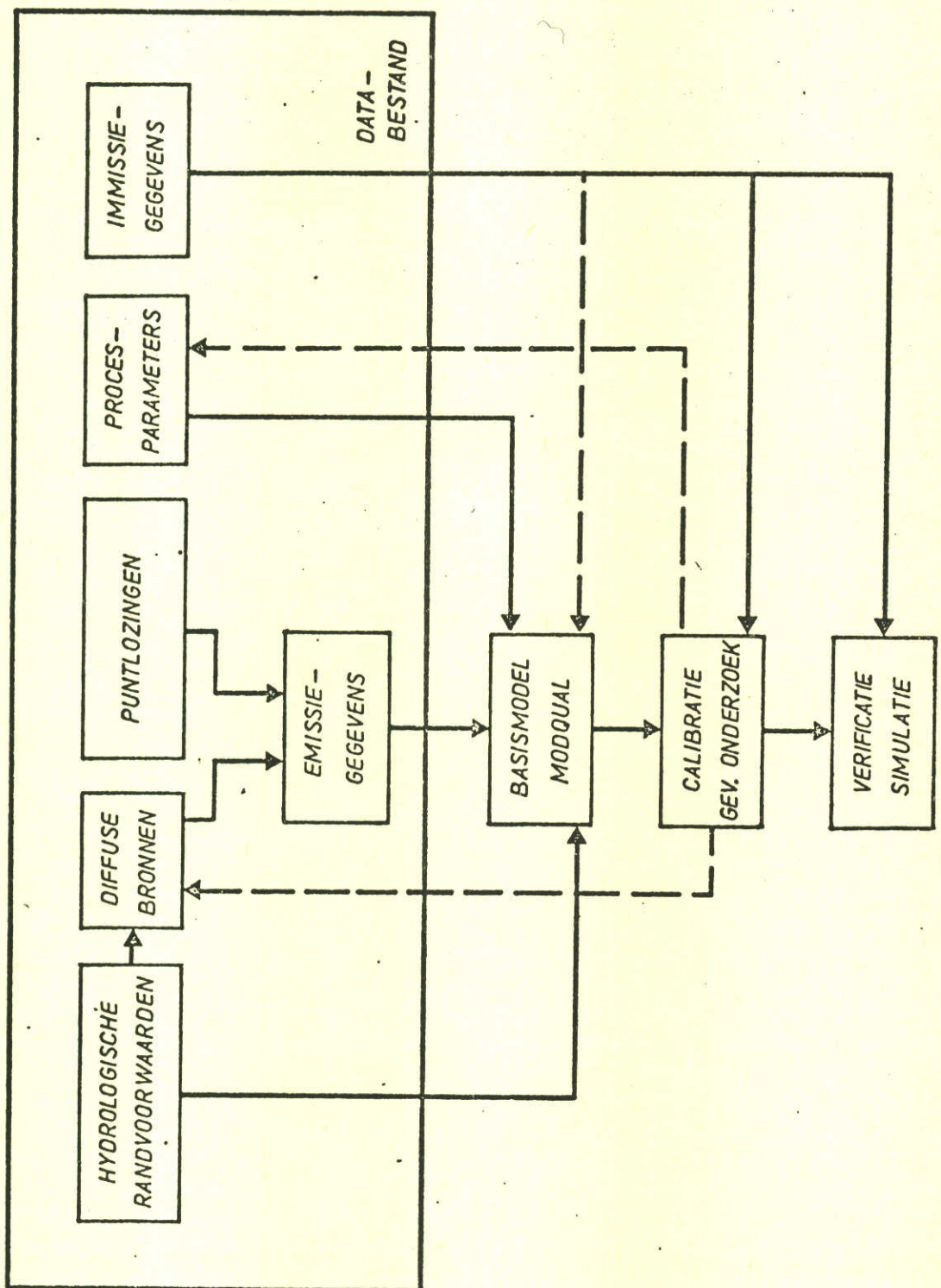
A4



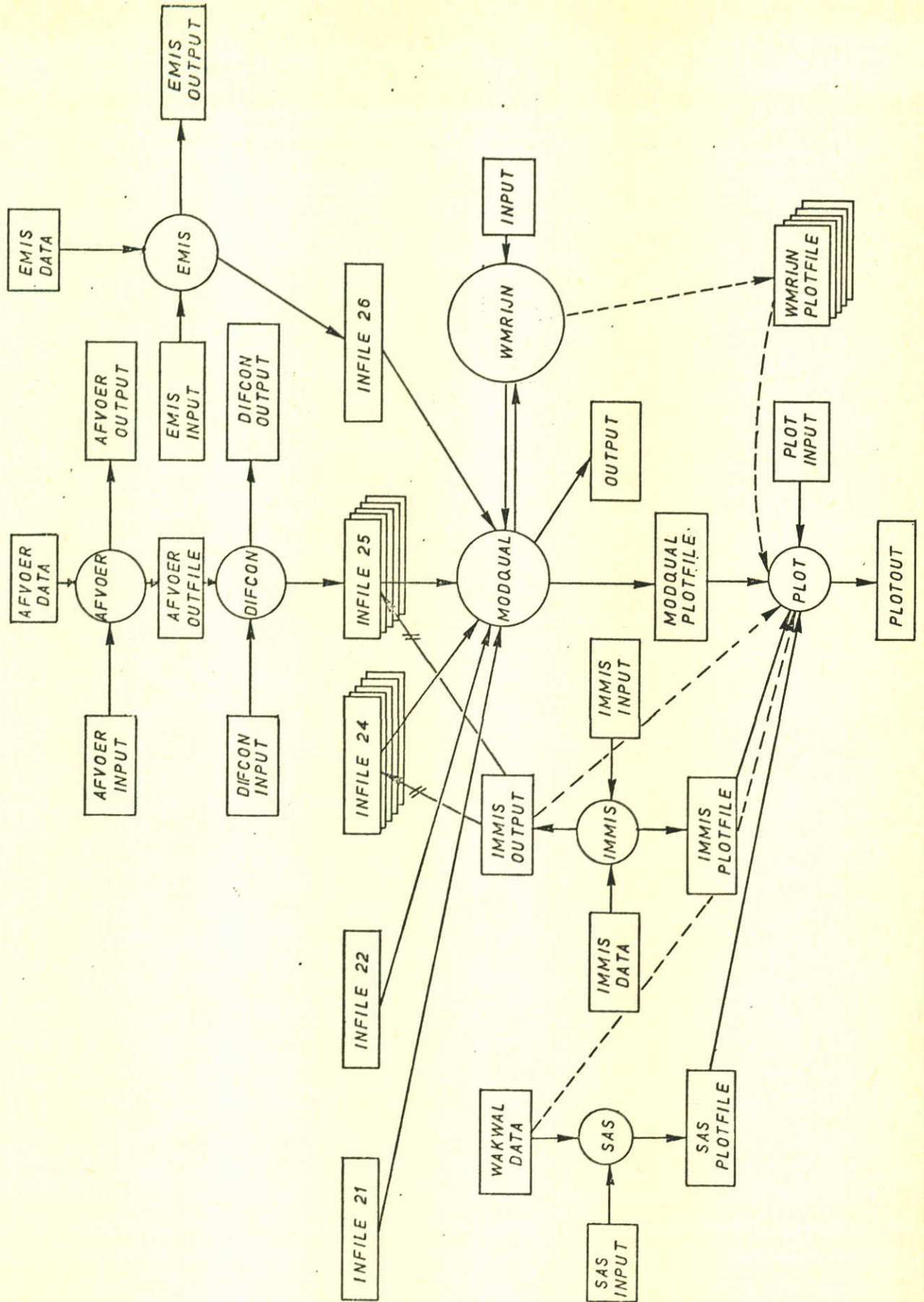
Integrale modelstructuur van MODQUAL



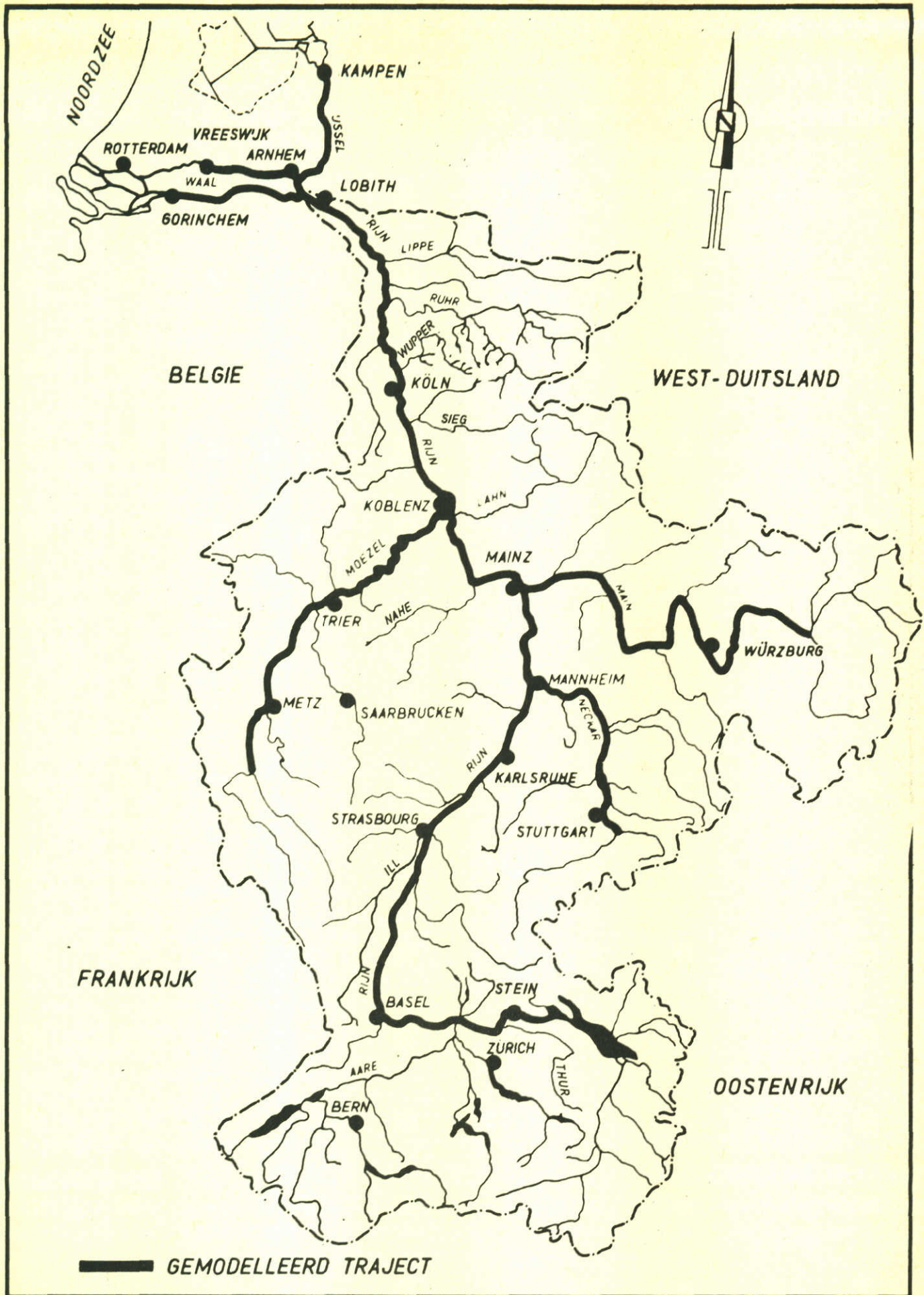
Rivierschematisatie door MODQUAL in trajecten  
en rekenelementen



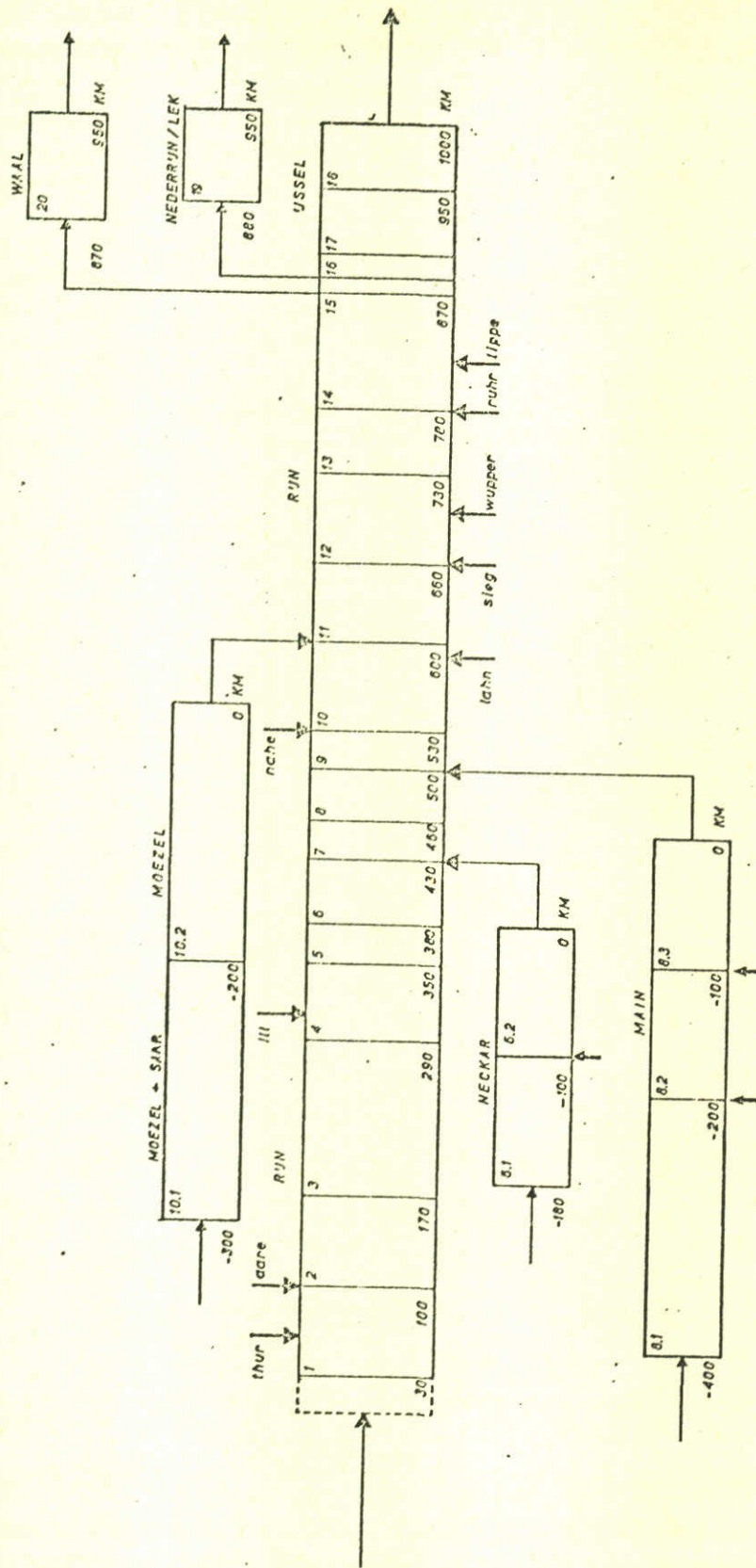
Het basismodel MODQUAL in relatie tot het databestand en procedures voor kalibratie en verificatie



Modelopzet van het waterkwaliteitsmodel Rijn

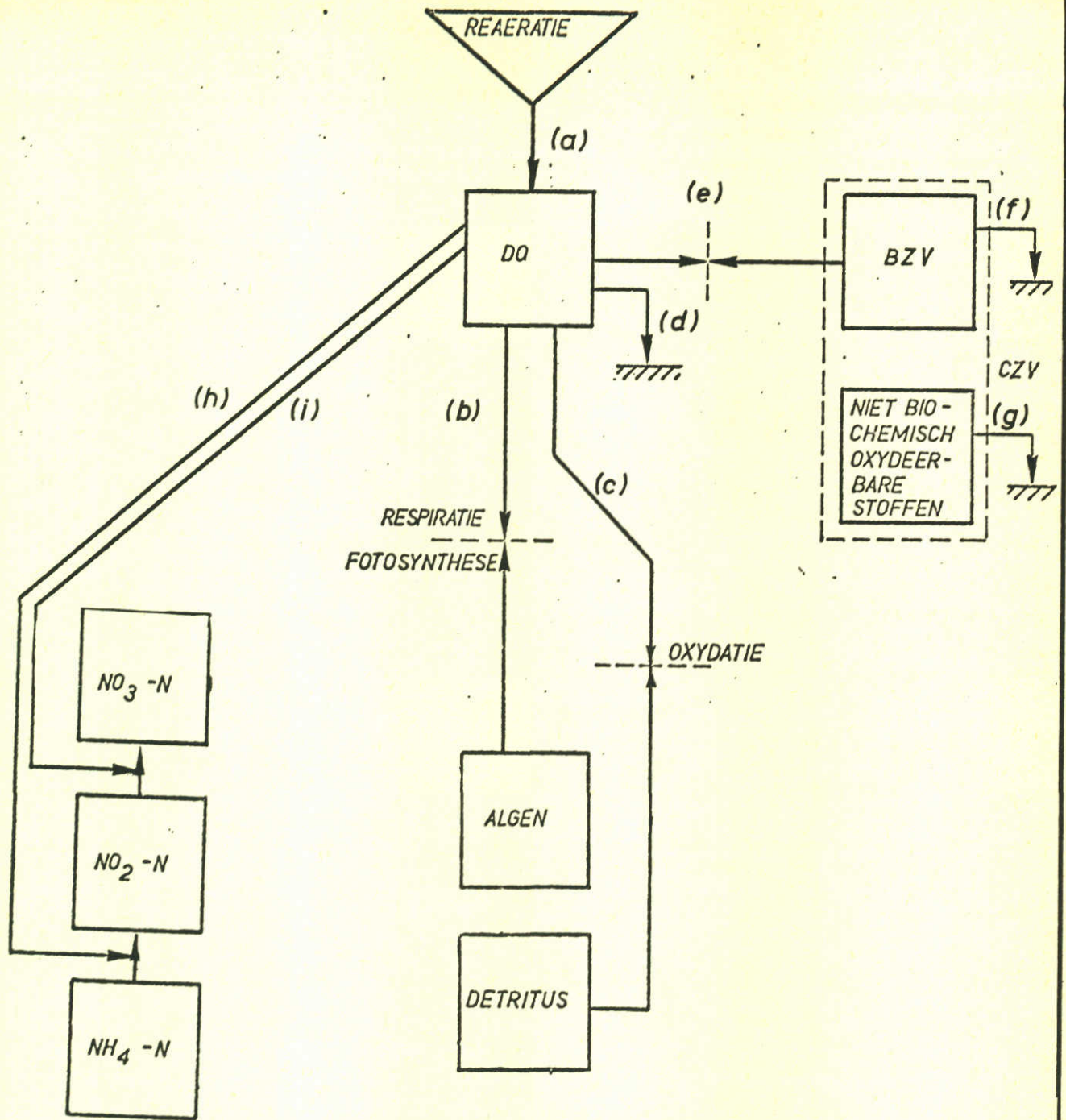


Het gemodelleerde deel van het stroomgebied van de Rijn



Rivierschematisatie van het waterkwaliteitsmodel Rijn



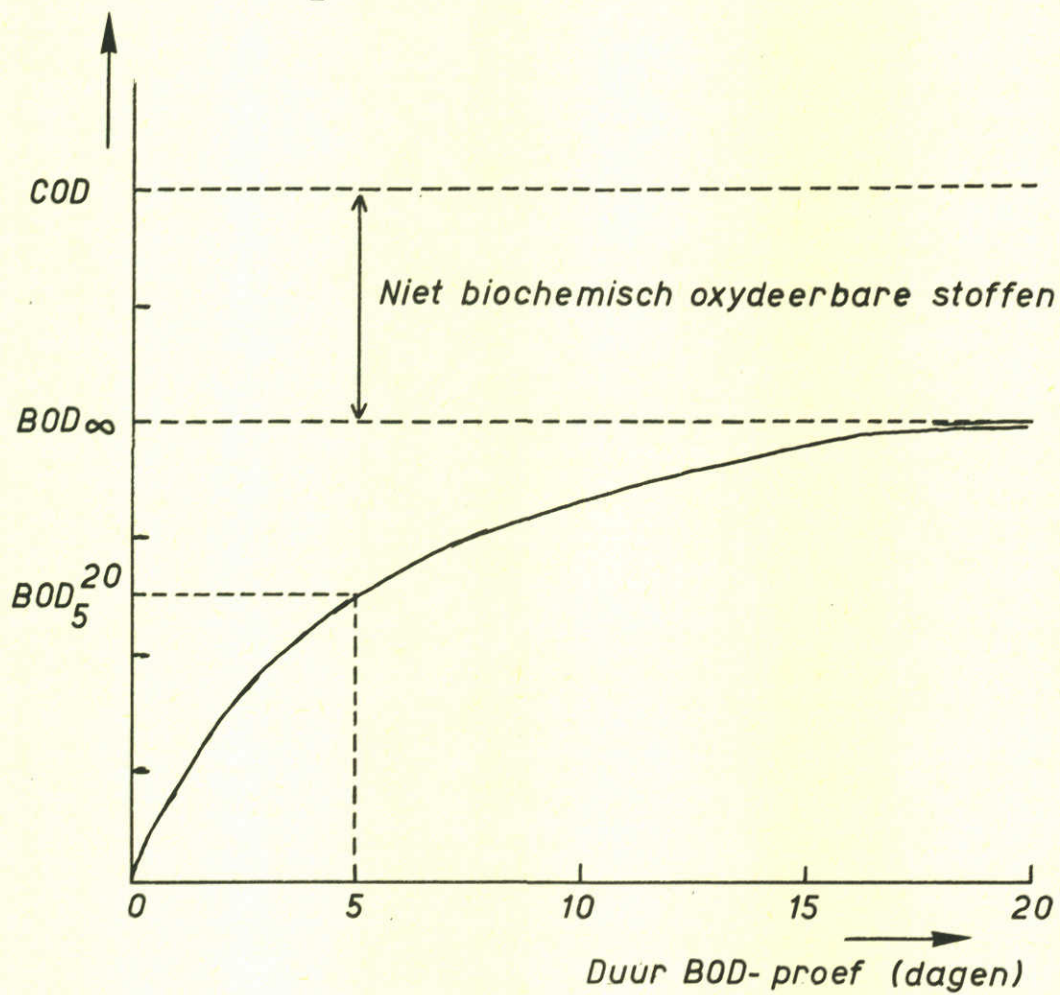


- (a) zuurstofuitwisseling via het grensvlak lucht/water
- (b) zuurstofproductie (fotosynthese) en respiratie door algen
- (c) zuurstofverbruik bij afbraak van detritus
- (d) zuurstofverbruik door de bodem
- (e) zuurstofverbruik bij biochemische afbraak van organische koolstof
- (f) bezinking van biochemisch afbreekbare organische koolstof
- (g) bezinking van niet biochemisch oxydeerbare stoffen
- (h) zuurstofverbruik bij oxydatie van  $\text{NH}_4$  tot  $\text{NO}_2$  (1e trap nitrifikatie)
- (i) zuurstofverbruik bij oxydatie van  $\text{NO}_2$  tot  $\text{NO}_3$  (2e trap nitrifikatie)

Schematisering van de zuurstofhuishouding in MODQUAL

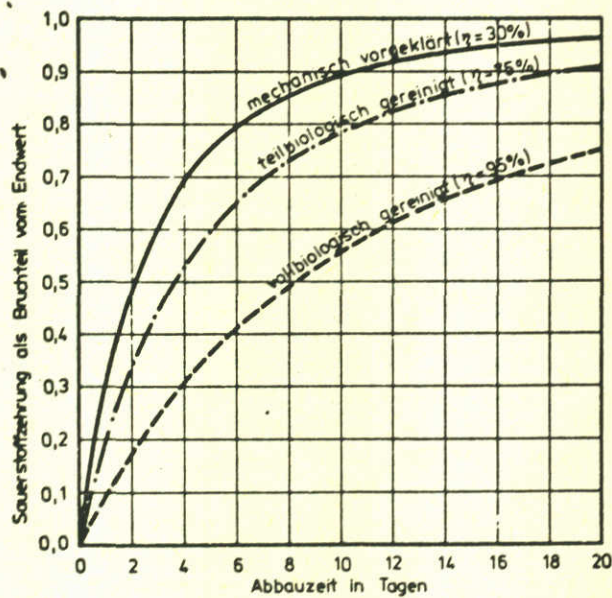
A4

Zuurstofverbruik ( $\text{g O}_2/\text{m}^3$ )

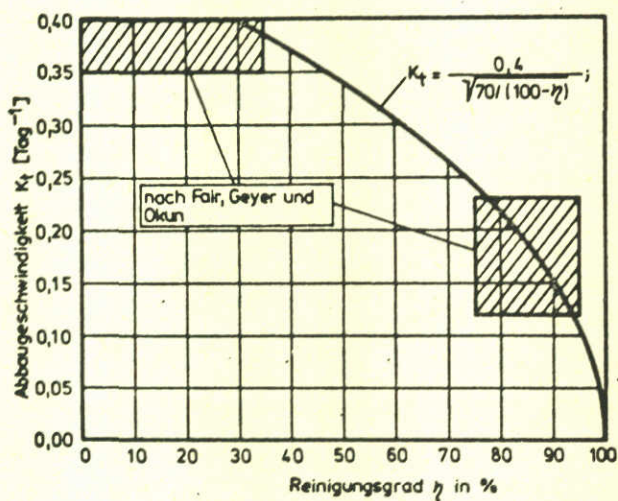


Zuurstofverbruik bij oxydatie van organisch koolstof  
en de betekenis van  $BOD_5$ ,  $BOD_\infty$  en COD

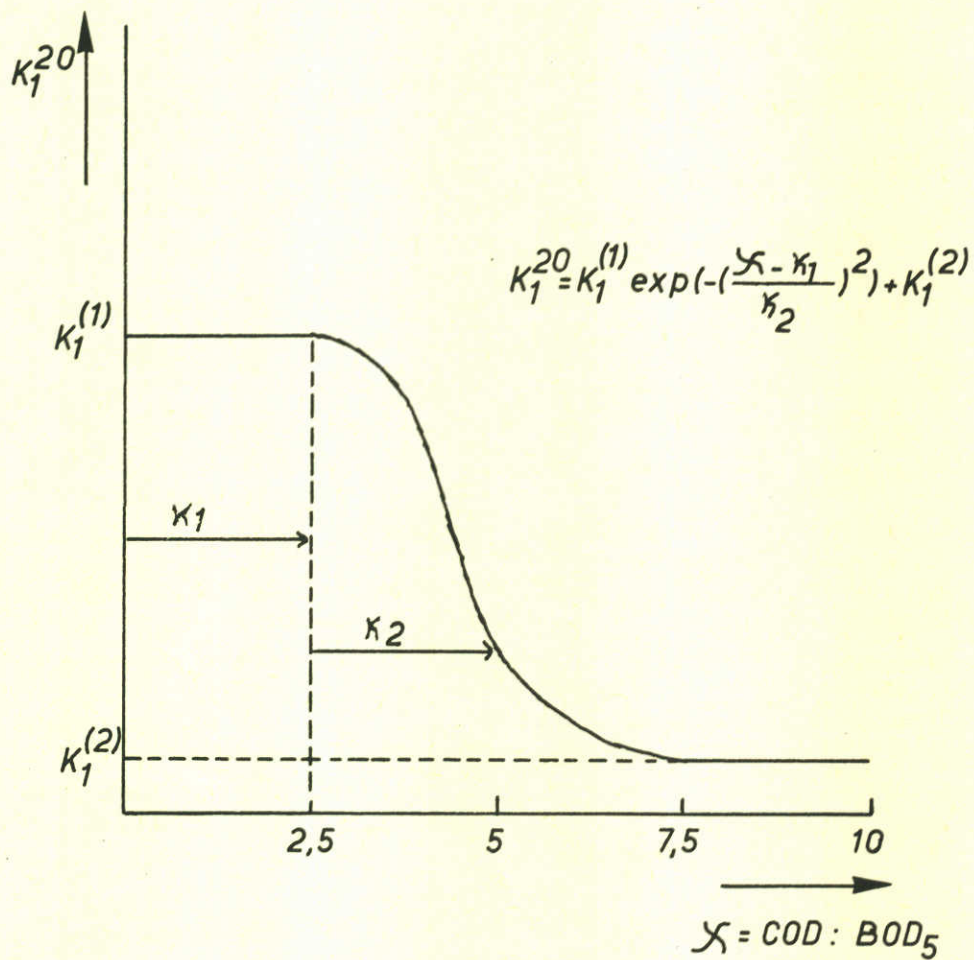
## Theoretischer Verlauf der Sauerstoffzehrung bei unterschiedlich vorgereinigten Hausabwässern



## Die Abbaugeschwindigkeit $K_t$ in Abhängigkeit vom Reinigungsgrad $\eta$

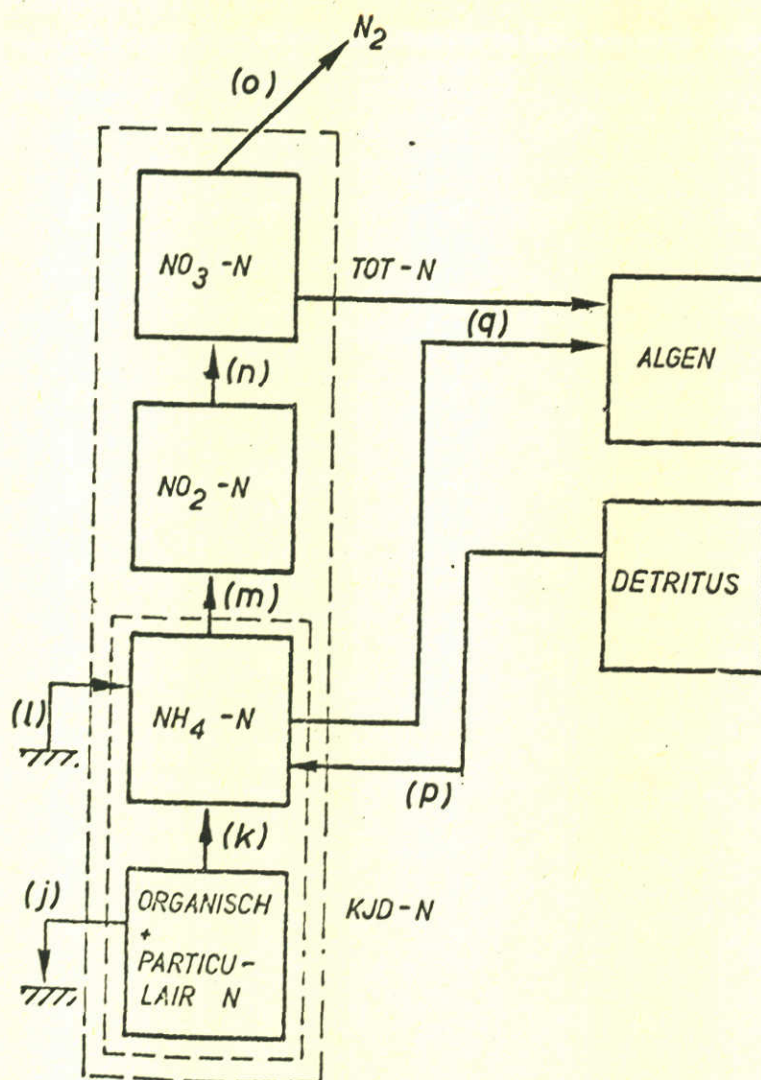


Invloed van zuivering op de afbraaksnelheid van BOD-C, [5]



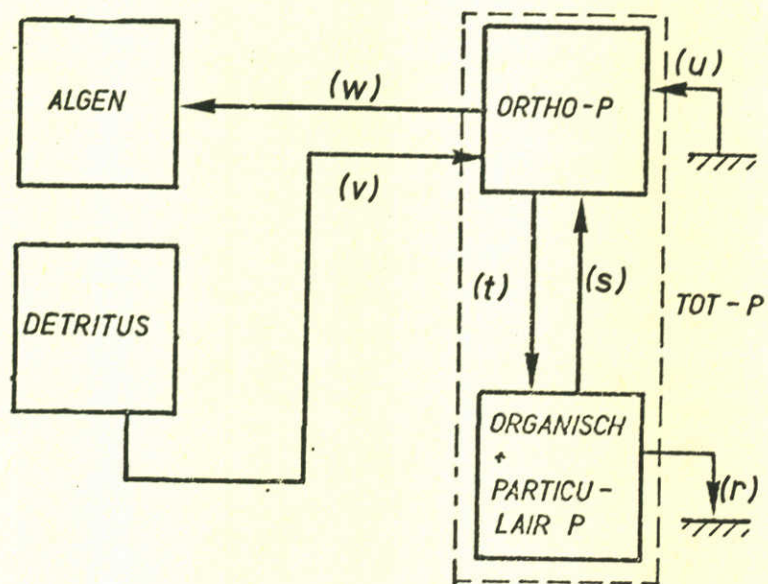
Relatie van de afbraaksnelheid van BOD-C op basis van de verhouding COD/BOD<sub>5</sub>

A4



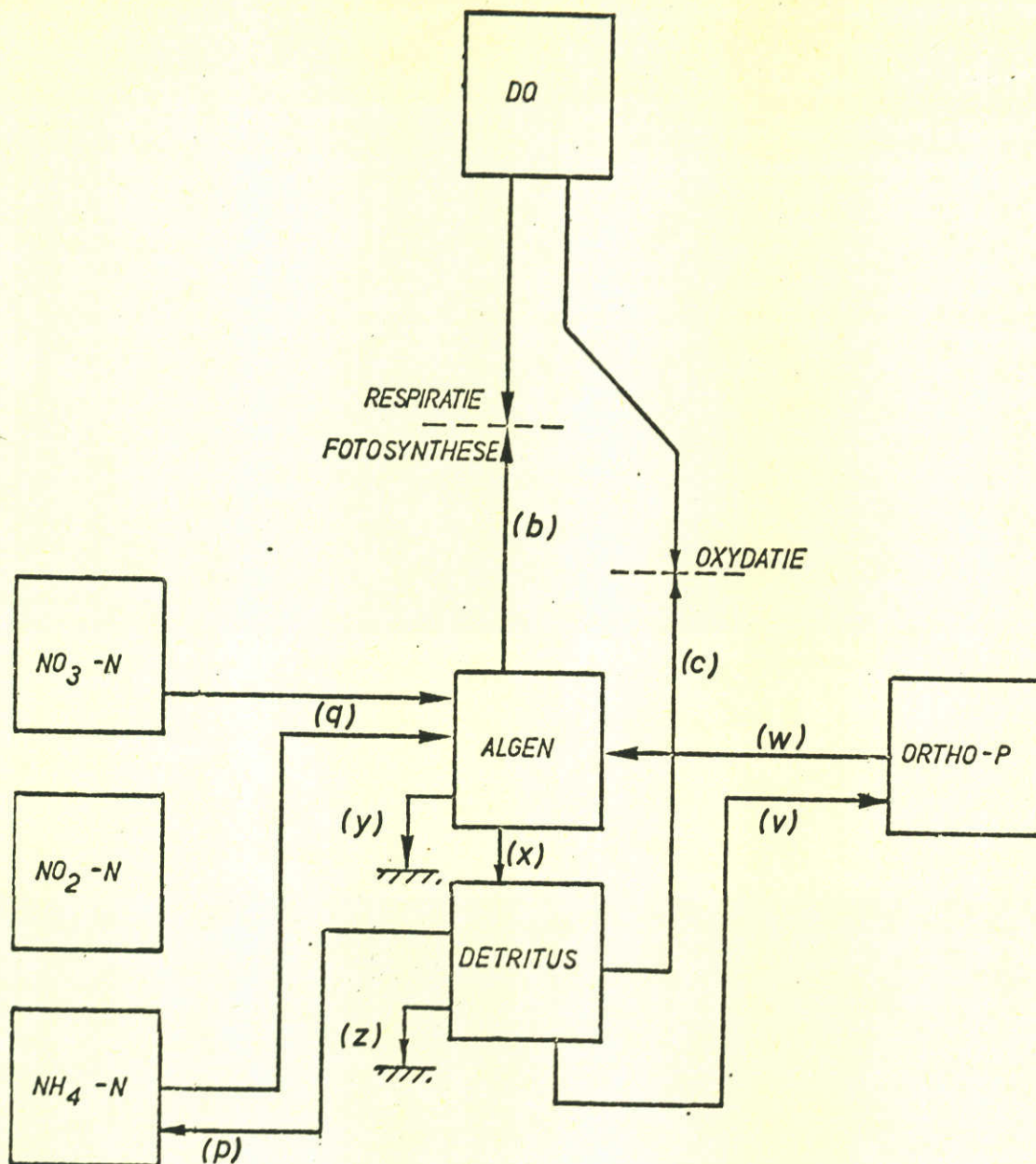
- (j) bezinking van organisch + partikulair stikstof
- (k) ammonifikatie van organisch stikstof
- (l) vrijkomen van NH<sub>4</sub> uit het sediment
- (m) oxydatie van NH<sub>4</sub> tot NO<sub>2</sub> (1e trap nitrifikatie)
- (n) oxydatie van NO<sub>2</sub> tot NO<sub>3</sub> (2e trap nitrifikatie)
- (o) denitrifikatie van NO<sub>3</sub>
- (p) vrijkomen van NH<sub>4</sub> bij afbraak van detritus
- (q) opname van NH<sub>4</sub>, danwel NO<sub>3</sub> door algen

Schematisering van de stikstofhuishouding in MODQUAL



- (r) bezinking van organische + partikulair fosfaat
- (s) mineralisatie en desorptie van organisch + partikulair P
- (t) adsorptie van ortho-P
- (u) vrijkomen van ortho-P uit het sediment
- (v) vrijkomen van ortho-P bij afbraak van detritus
- (w) opname van ortho-P door algen

Schematisering van de fosfaathuishouding in MODQUAL

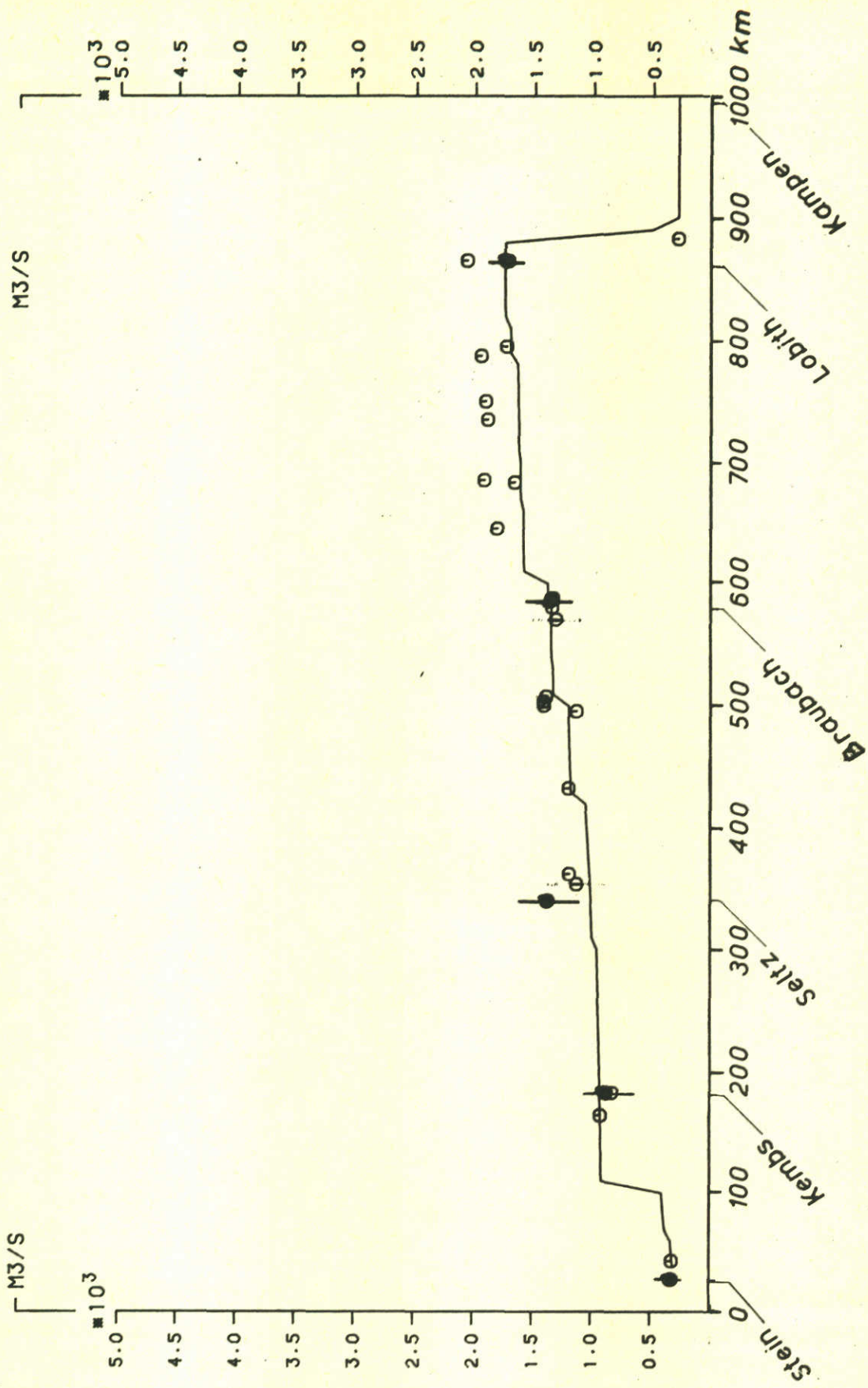


- (b,q,w) groei en respiratie van algen
- (x) afsterving van algen
- (y) bezinking van algen
- (z) bezinking van detritus
- (c,p,v) afbraak van detritus

Schematisering van de interacties m.b.t. algen en detritus in MODQUAL

RIJN/IJSSEL 1973

DEBIET



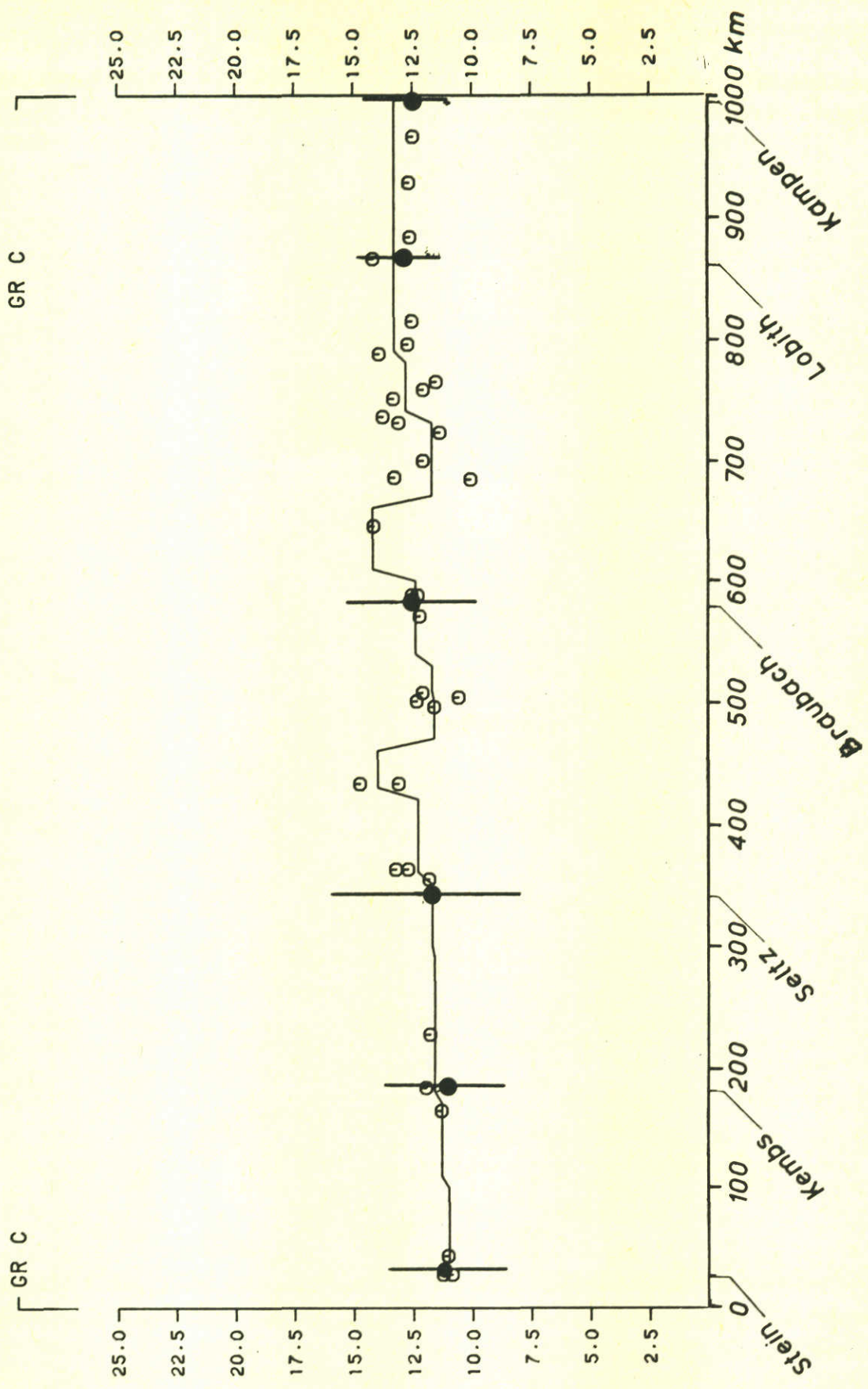
Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(debiet)

A4



RIJN/IJSSEL 1973

TEMPERATUUR



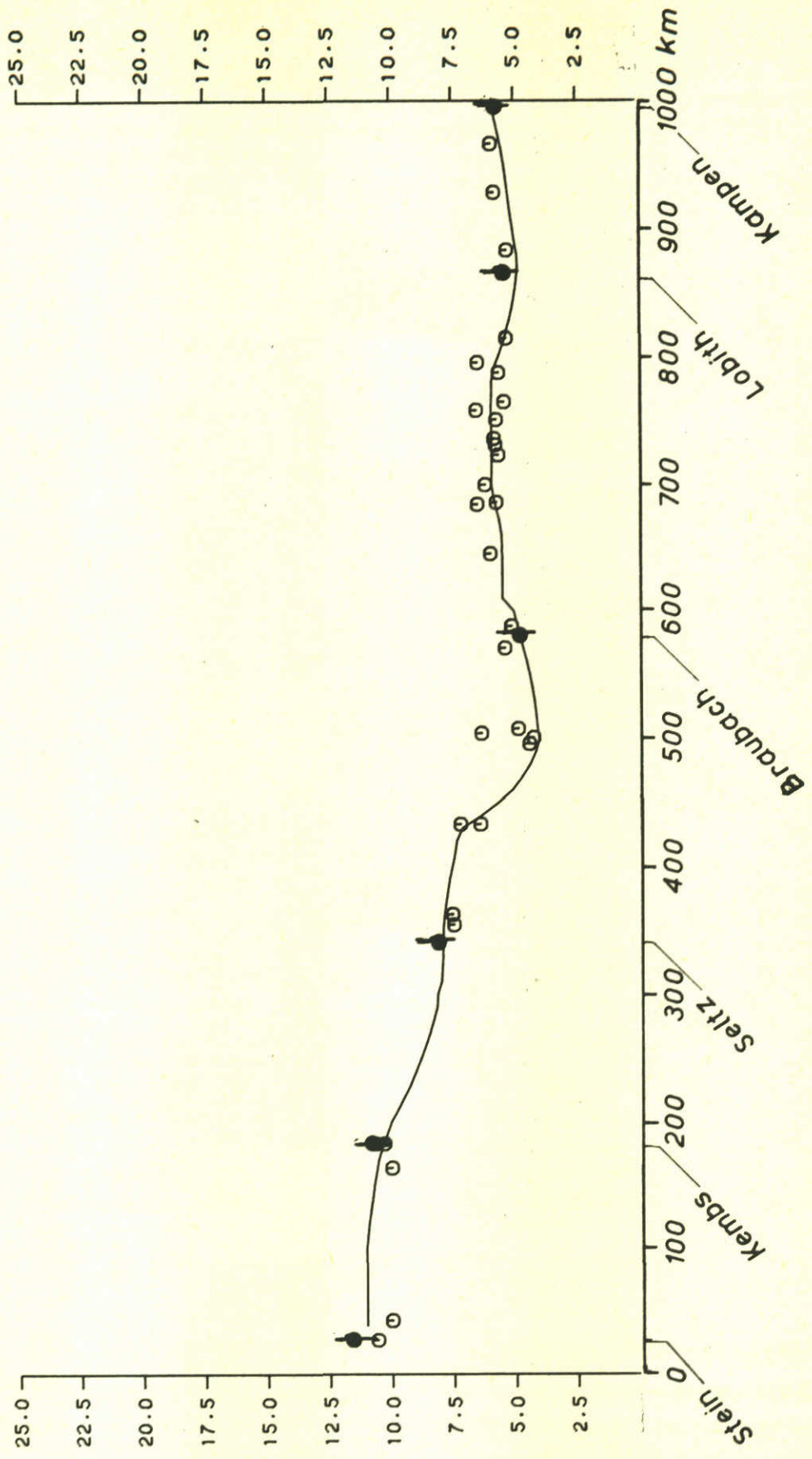
Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(temperatuur)

RIJN/IJSSEL 1973

ZUURSTOF

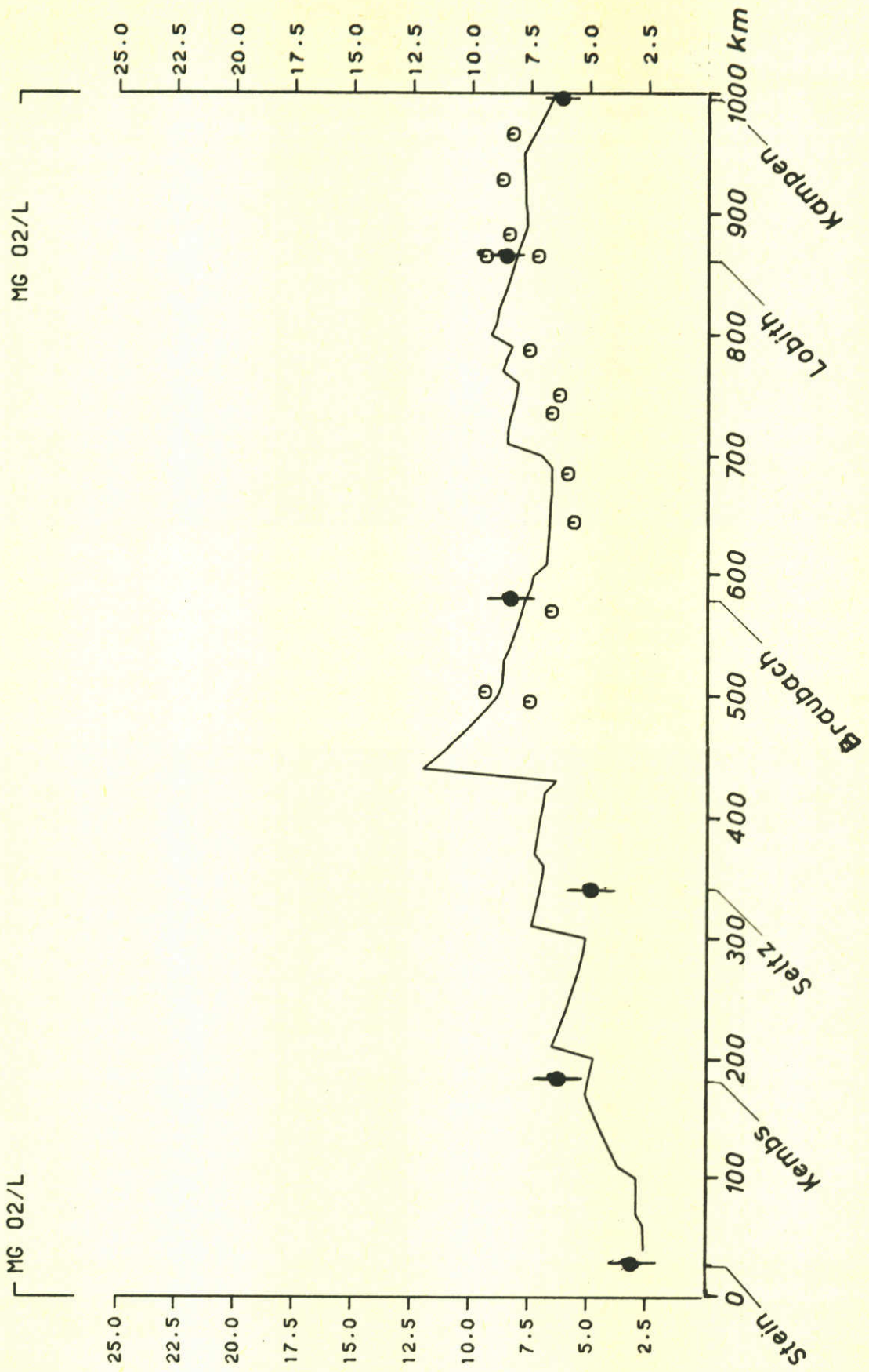
MG O<sub>2</sub>/L

MG O<sub>2</sub>/L



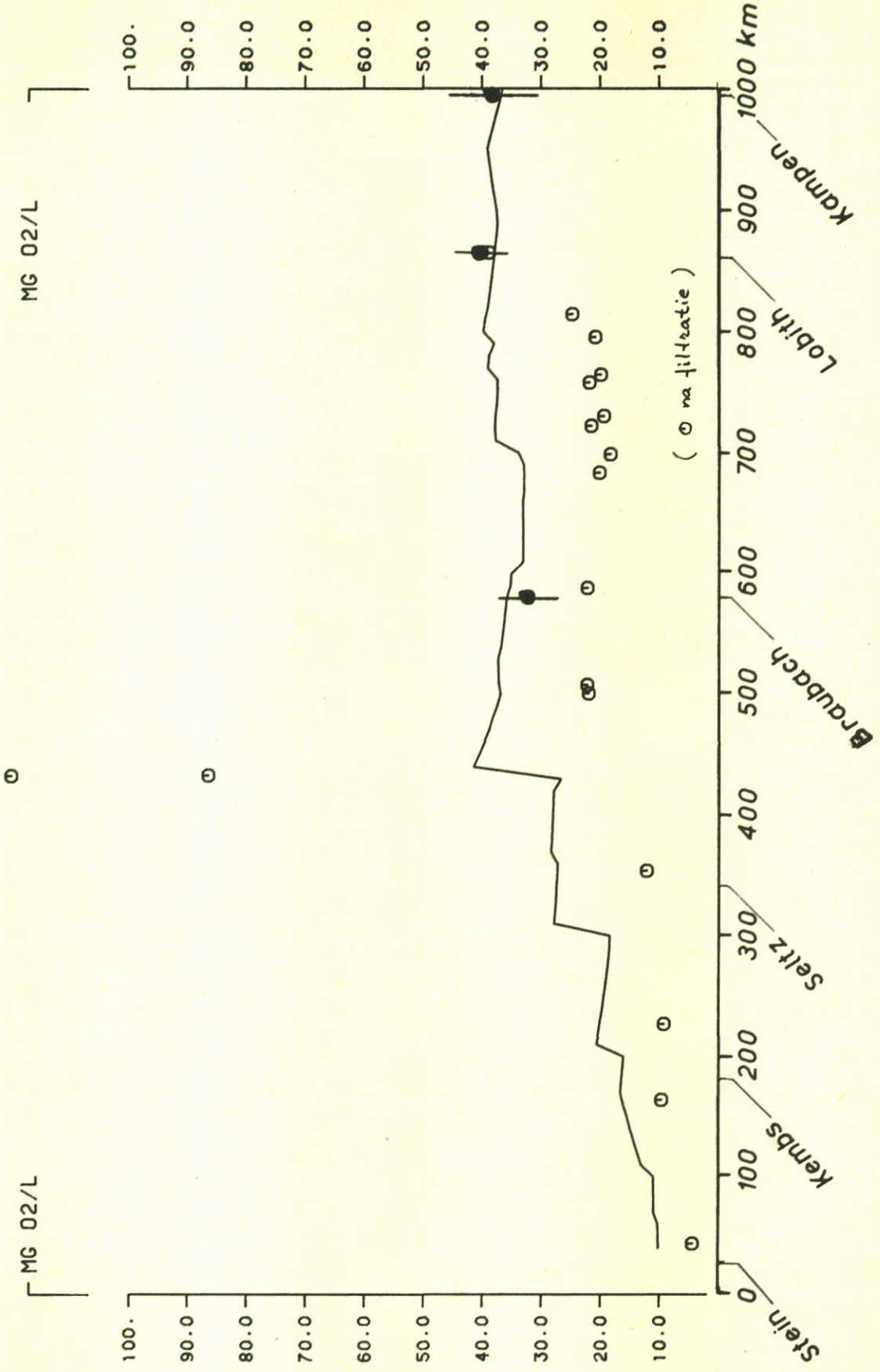
Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(zuurstof)

BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/IJSSEL 1973



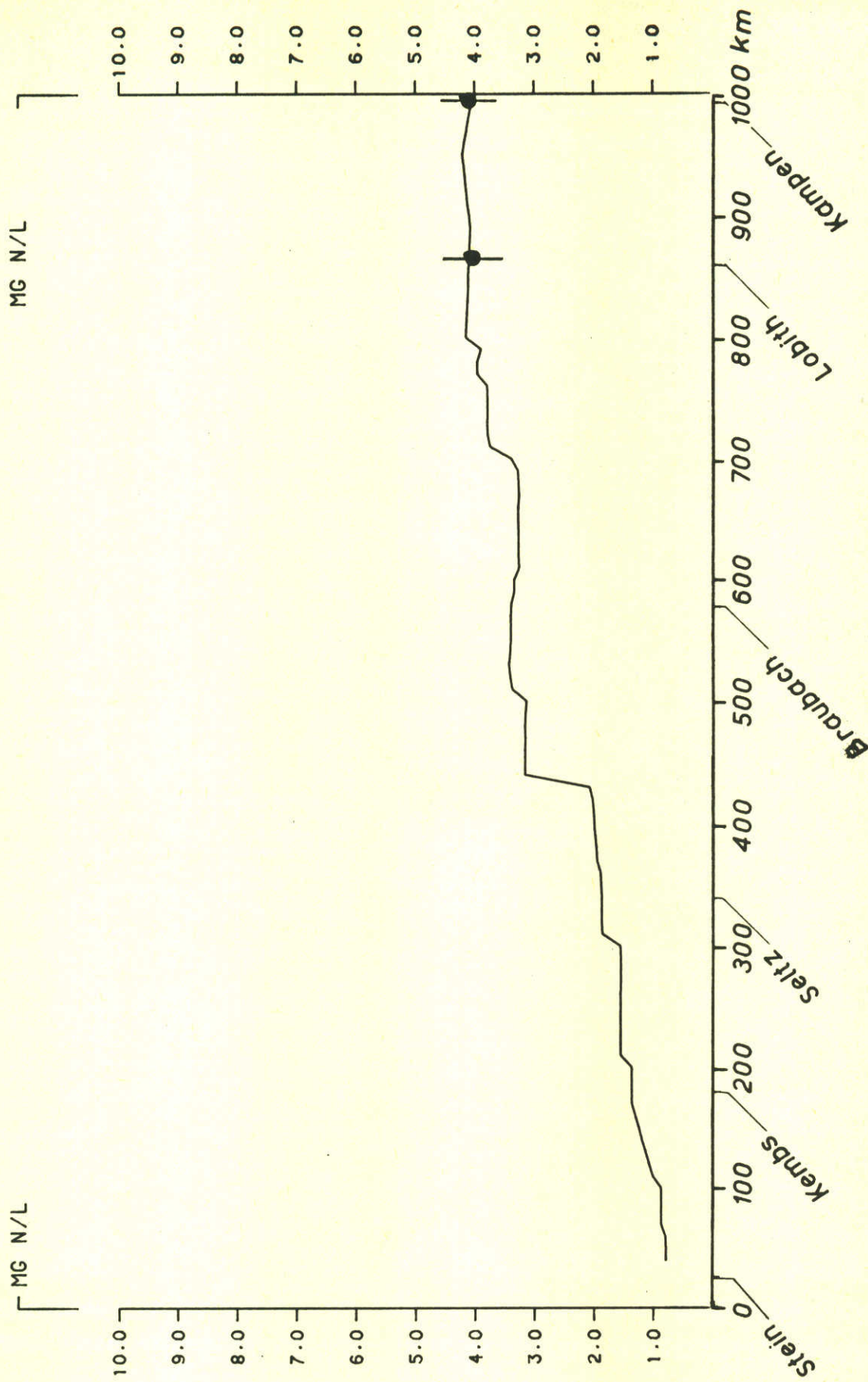
Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(BOD<sub>5</sub>)

CHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/IJSSEL 1973



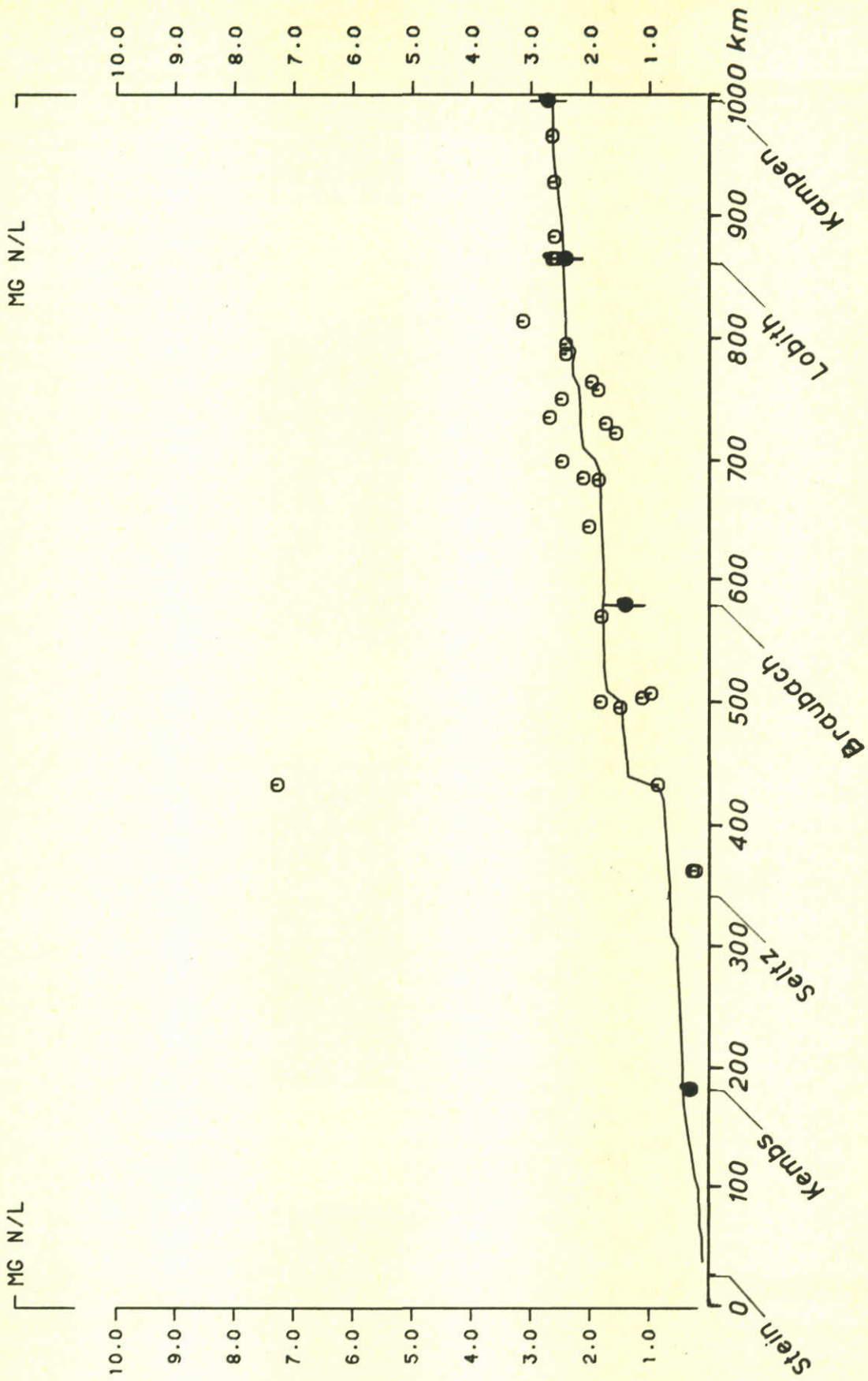
Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(COD)

KJELDAHL-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1973



Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(Kjd-N)

AMMONIUM-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1973

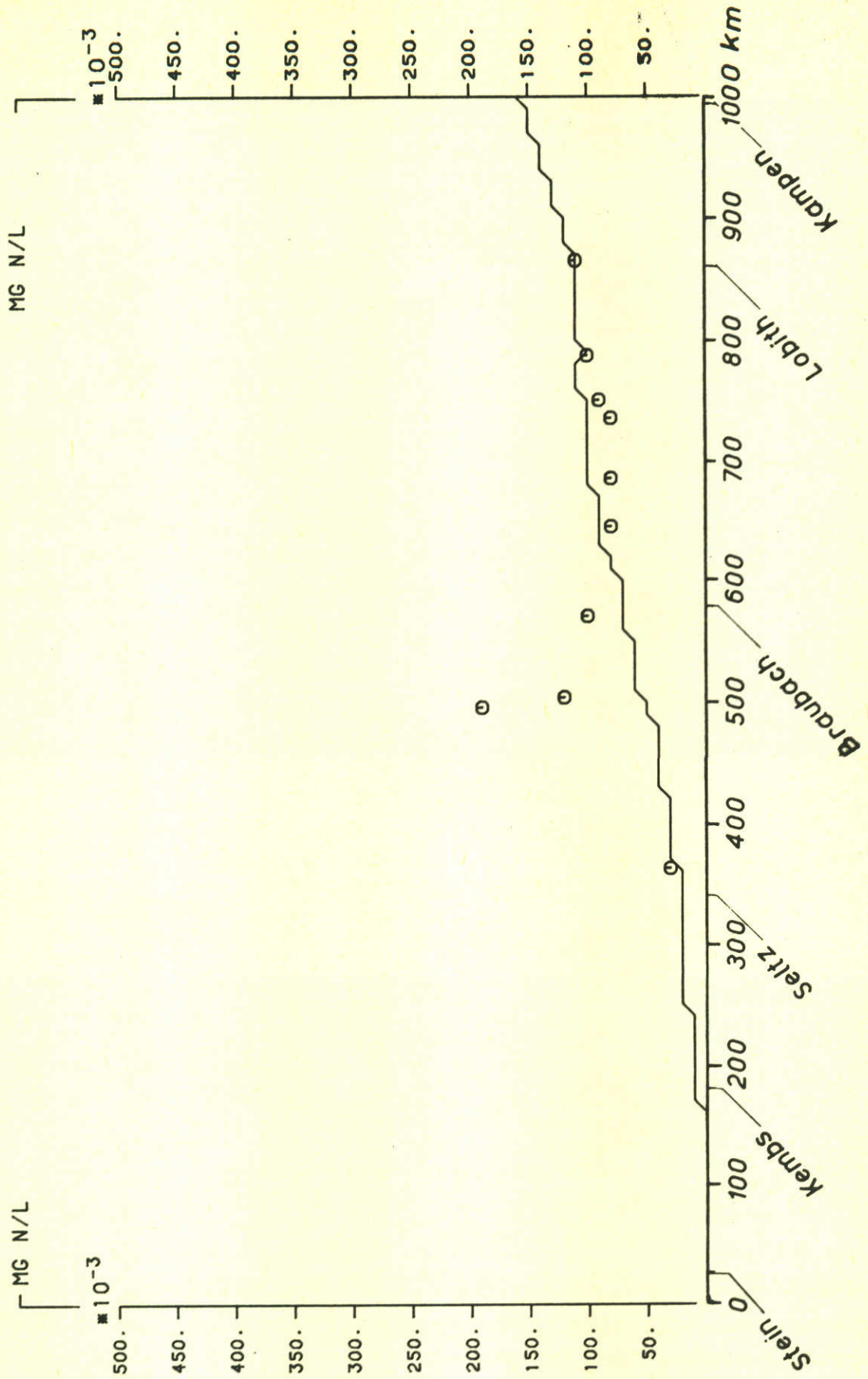


Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973

(NH<sub>4</sub>-N)

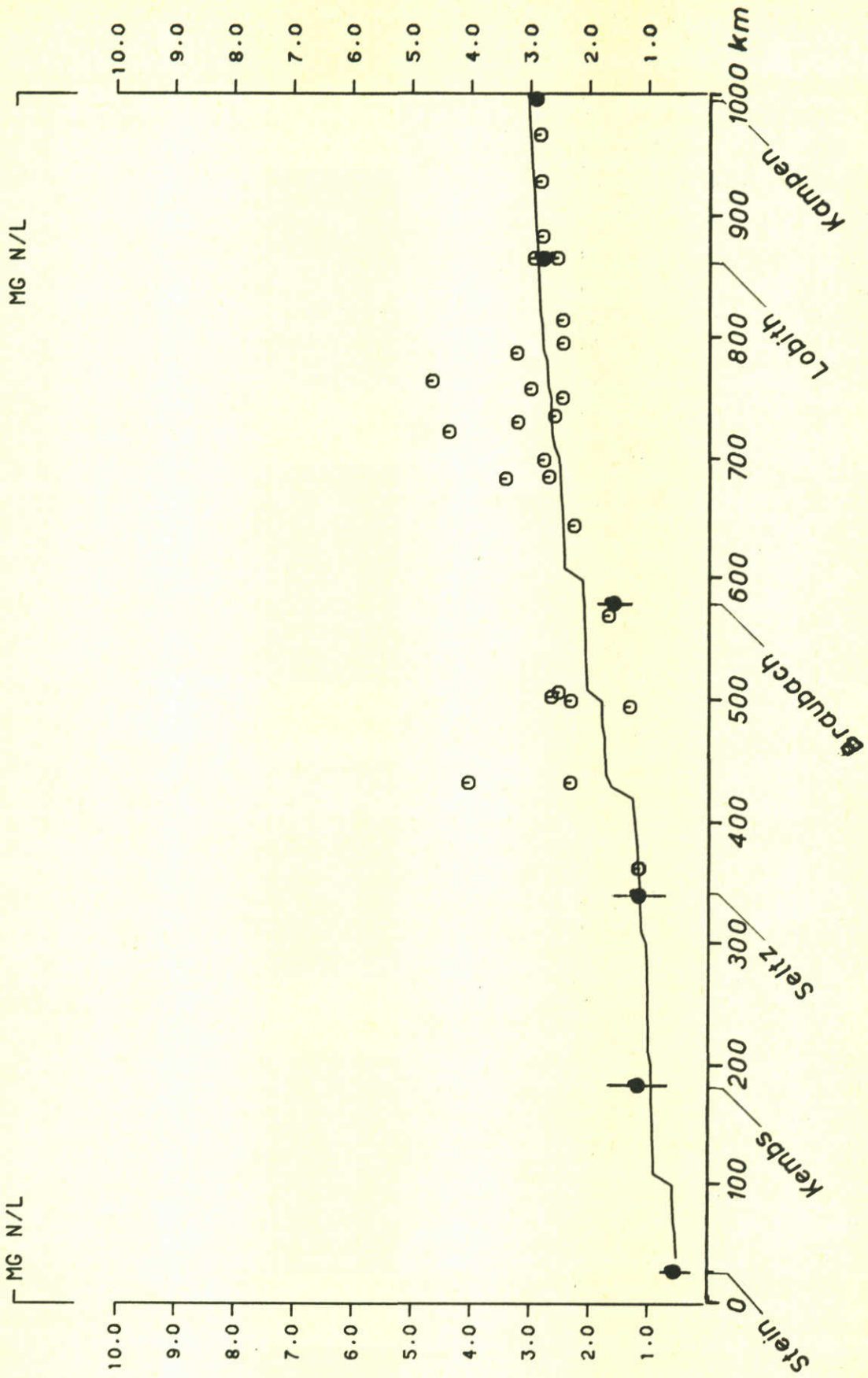
A4

NITRIET-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1973



Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(NO<sub>2</sub>-N)

NITRAAT-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1973

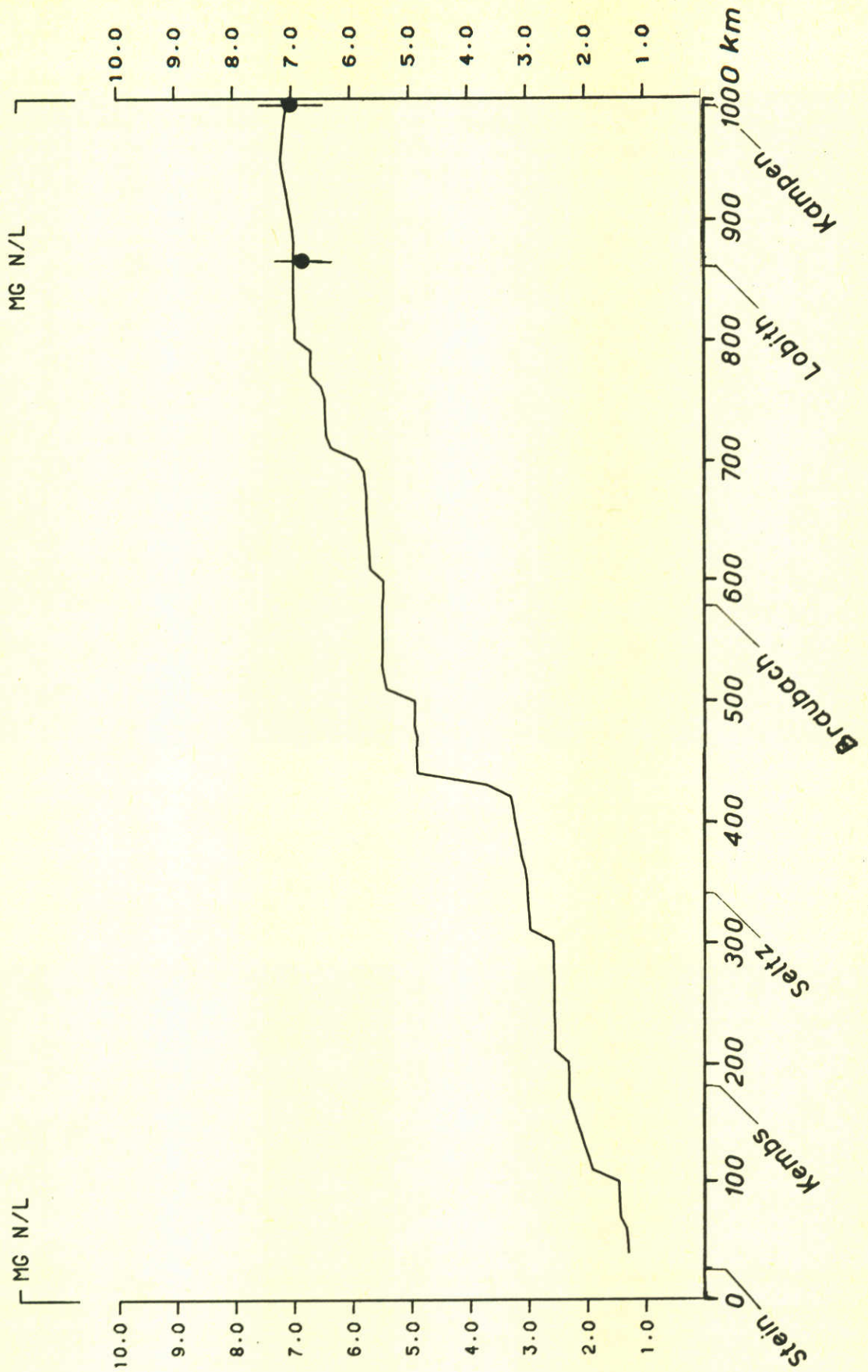


Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(NO<sub>3</sub>-N)



RIJN/IJSSEL 1973

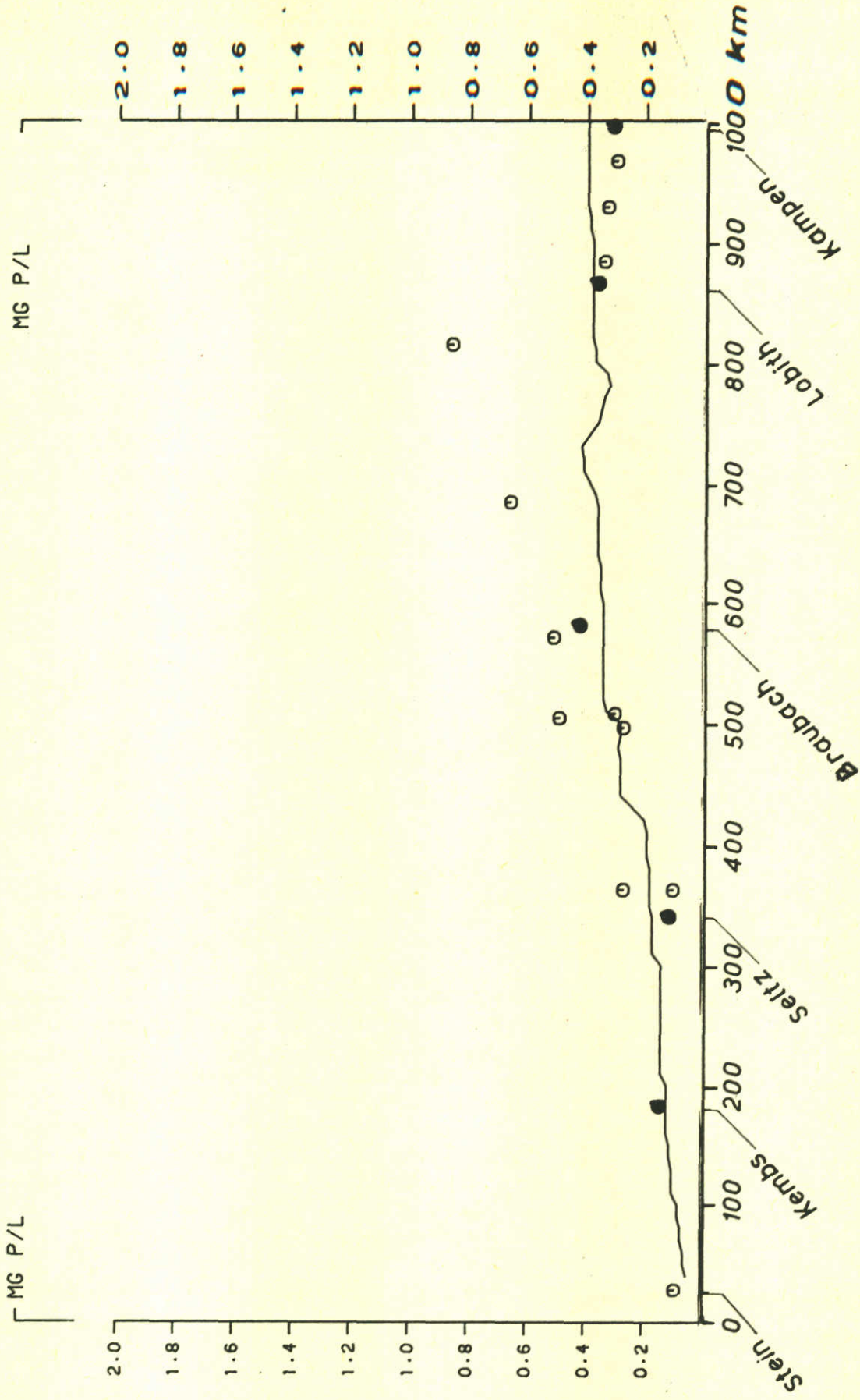
TOTAAL-STIKSTOF



Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(totaal-N)

RIJN/IJSSEL 1973

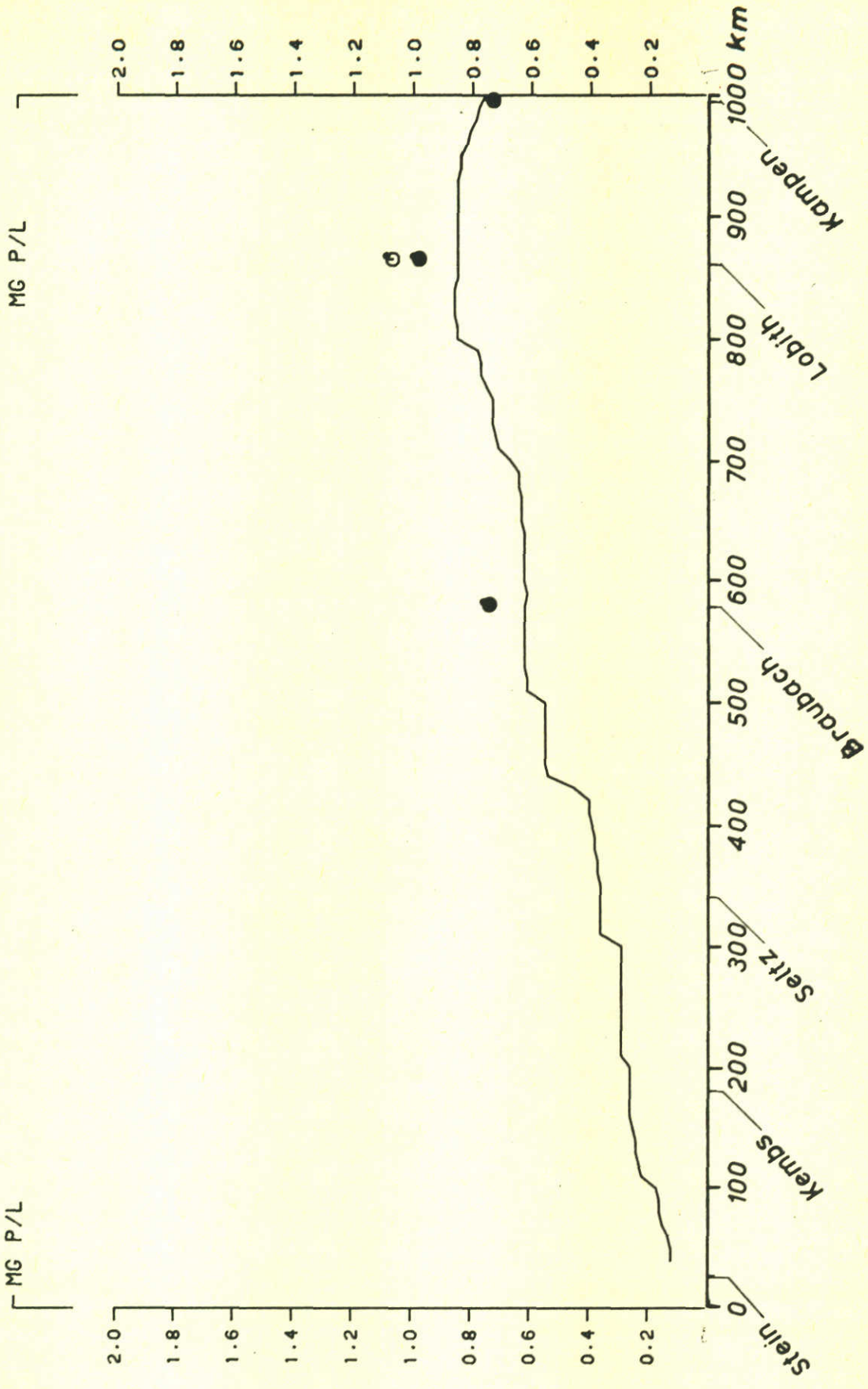
ORTHO-FOSFAAT



Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(ortho-P)

RIJN/IJSSEL 1973

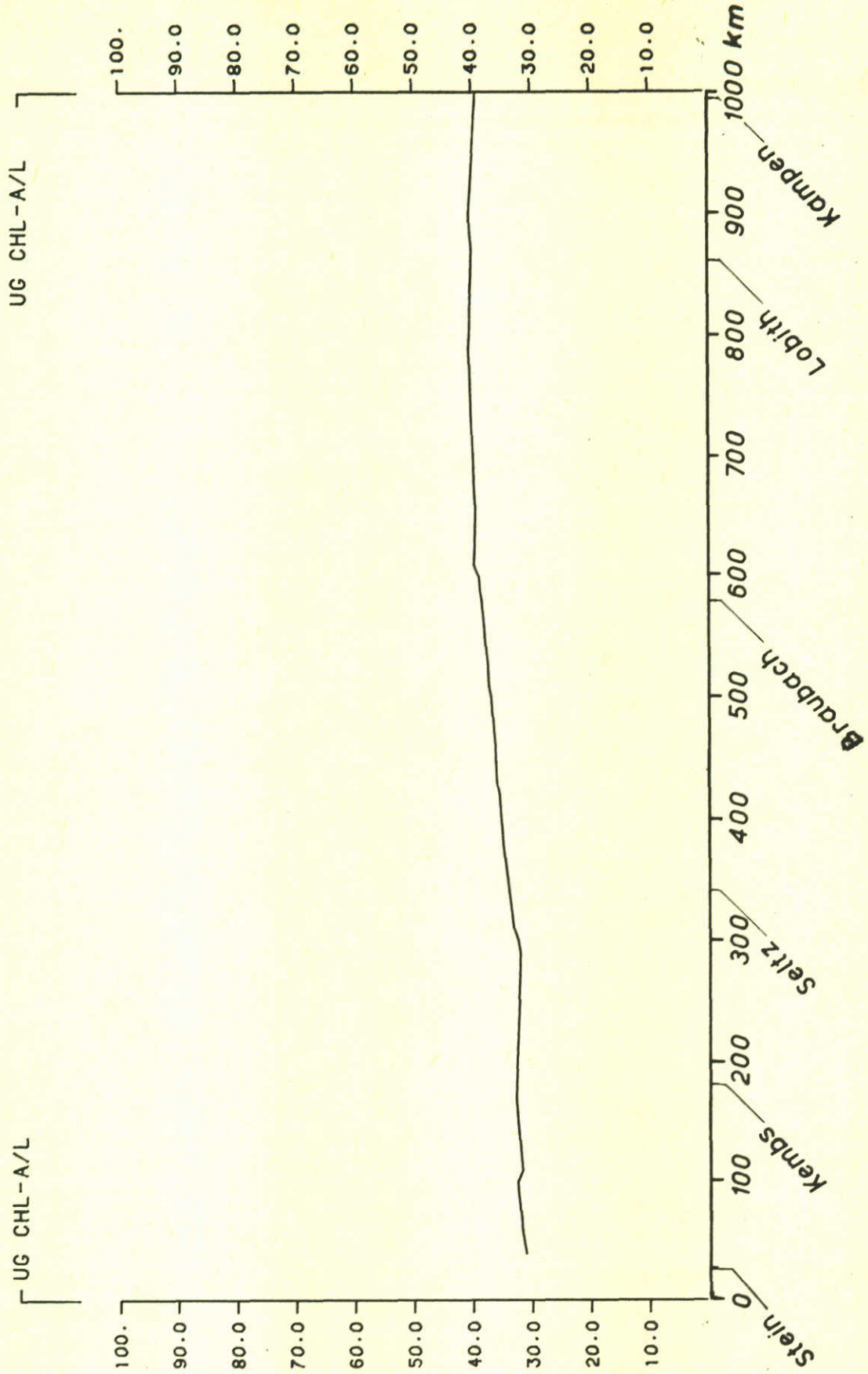
TOTAAL-FOSFAAT



Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(totaal-P)

RIJN/IJSSEL 1973

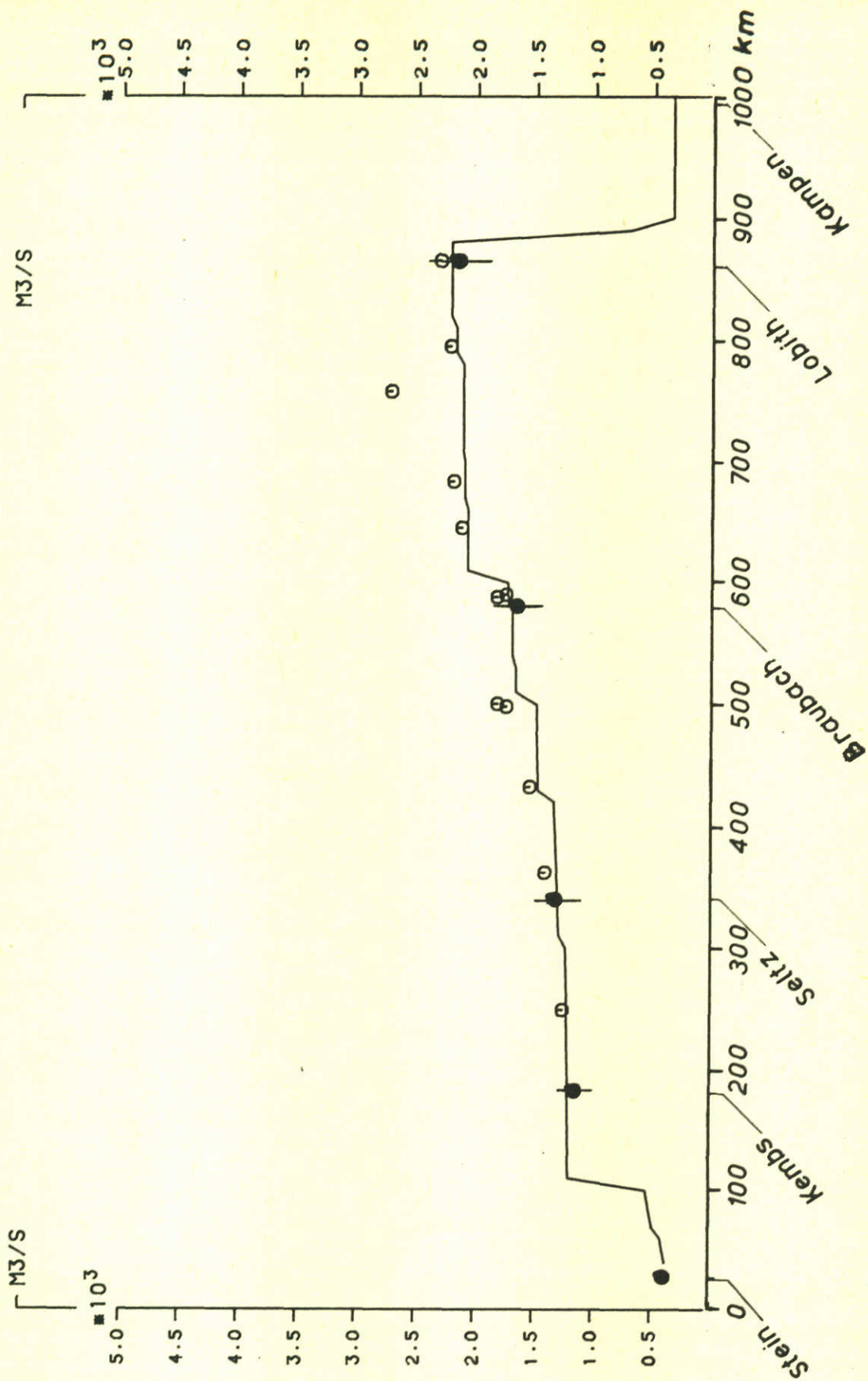
ALGEN



Modelkalibratie op basis van het jaargemiddelde 1973  
(algen)

# RIJN/IJSSEL 1977

## DEBIET

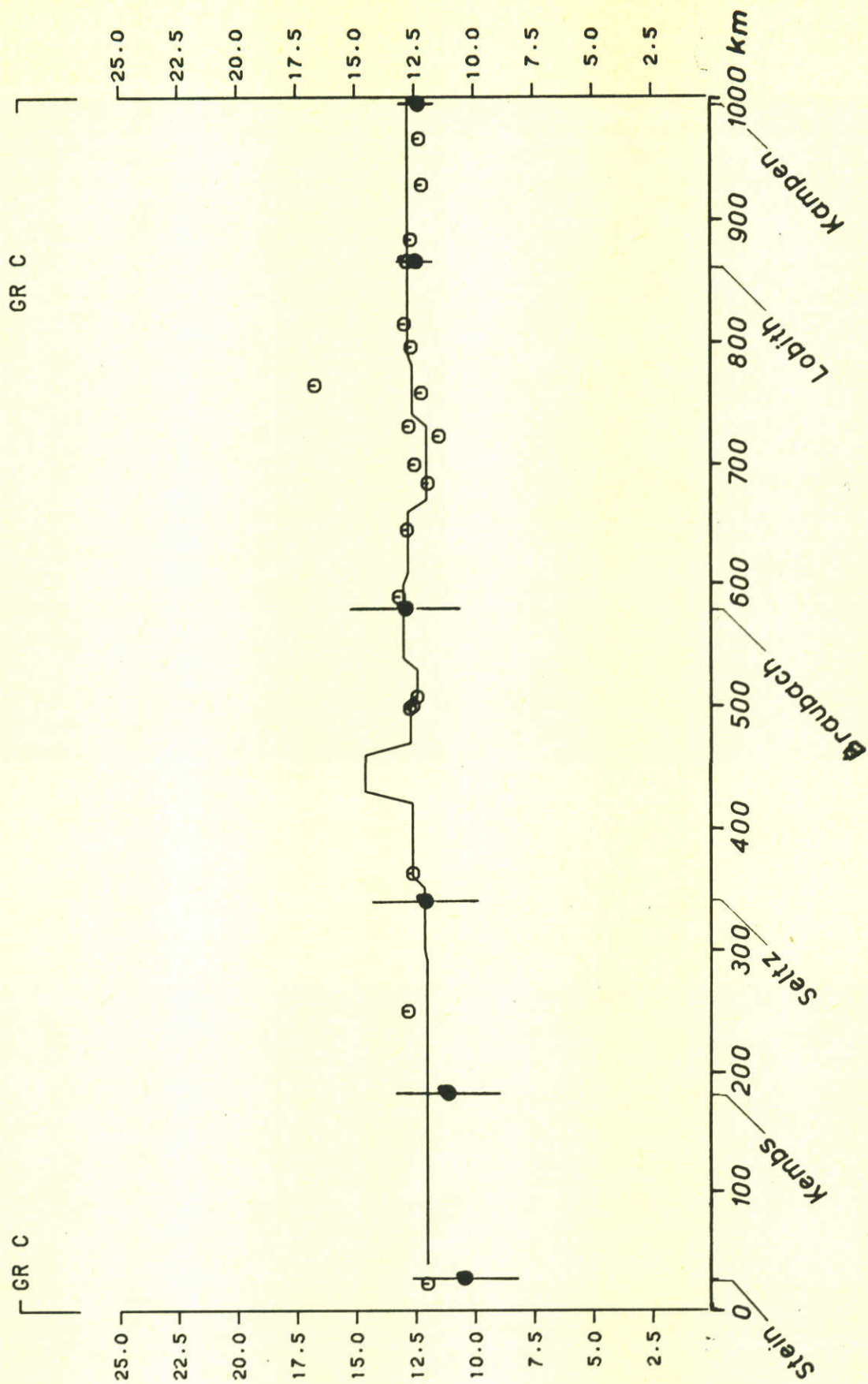


Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(debiet)

A4

RIJN/IJSSEL 1977

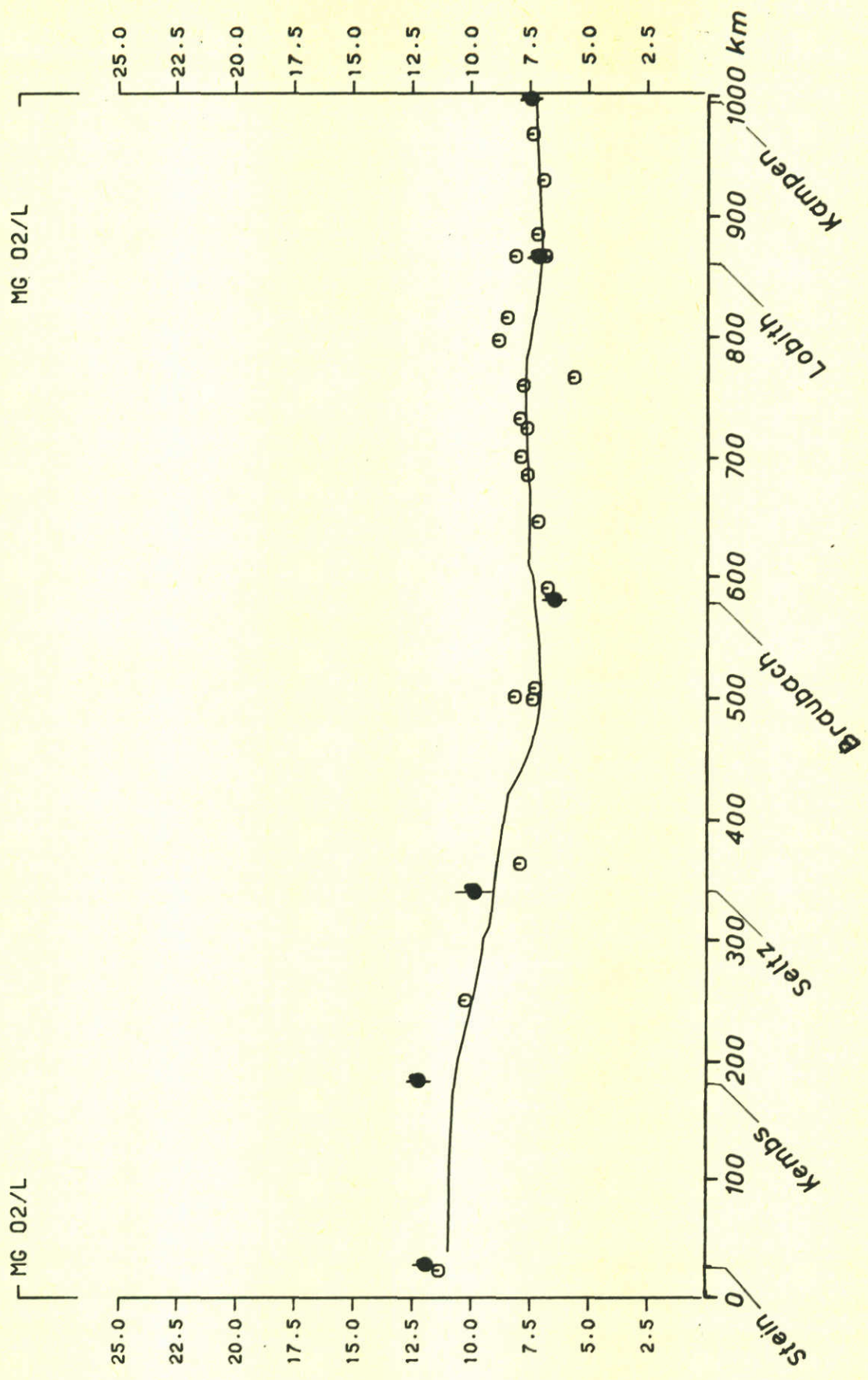
TEMPERATUUR



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(temperatuur)

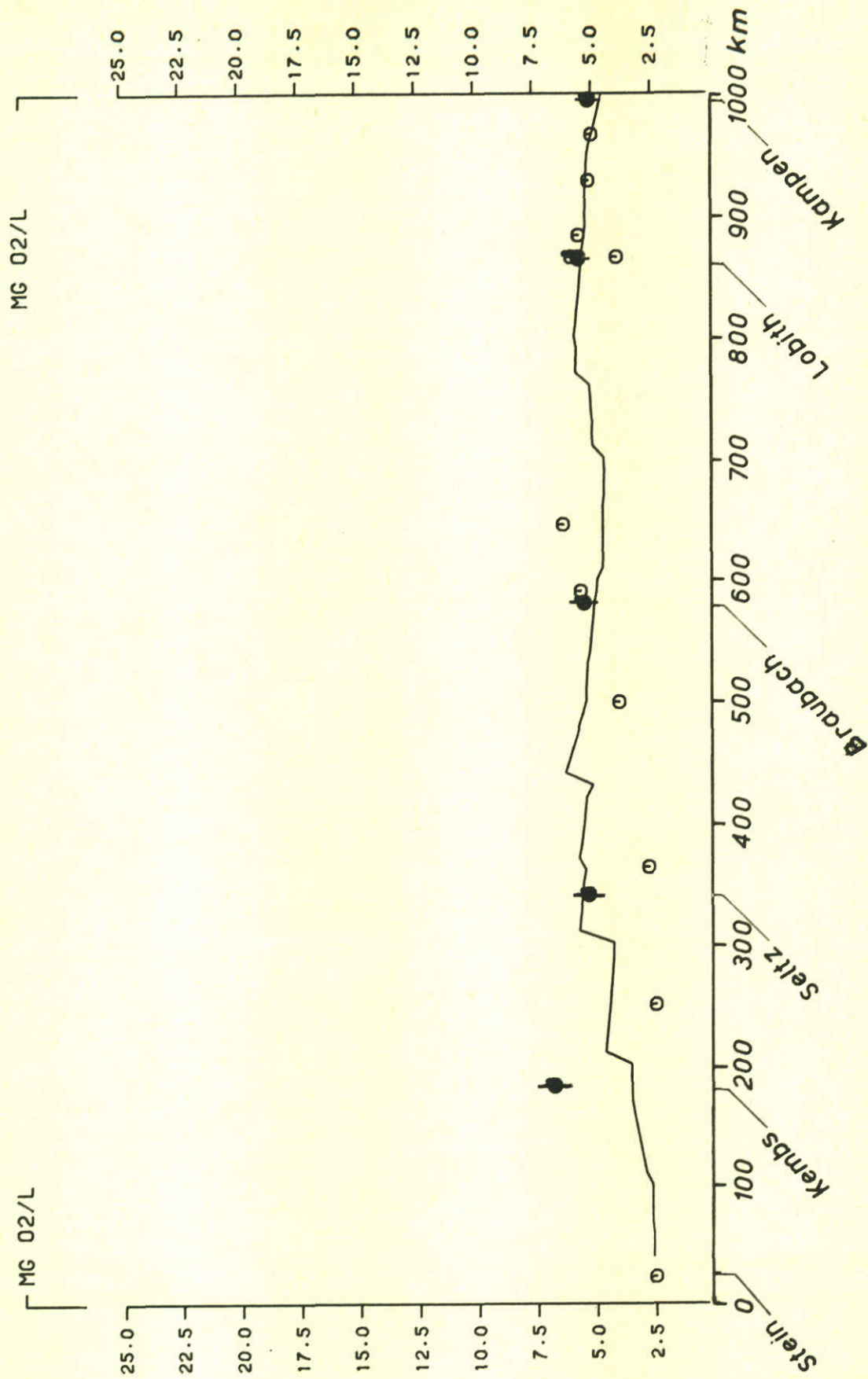
RIJN/IJSSEL 1977

ZUURSTOF



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(zuurstof)

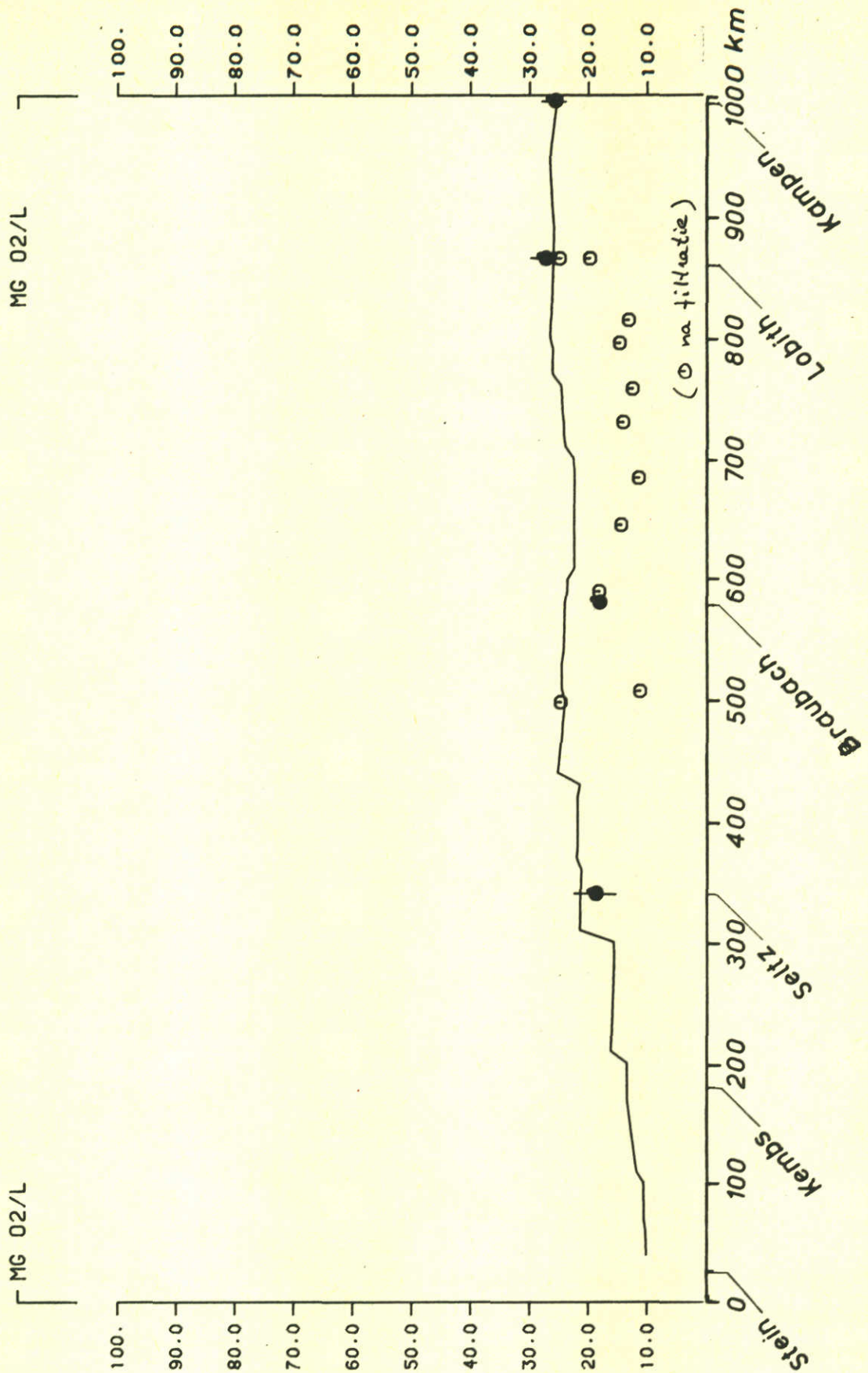
BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/IJSSEL 1977



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(BOD<sub>5</sub>)



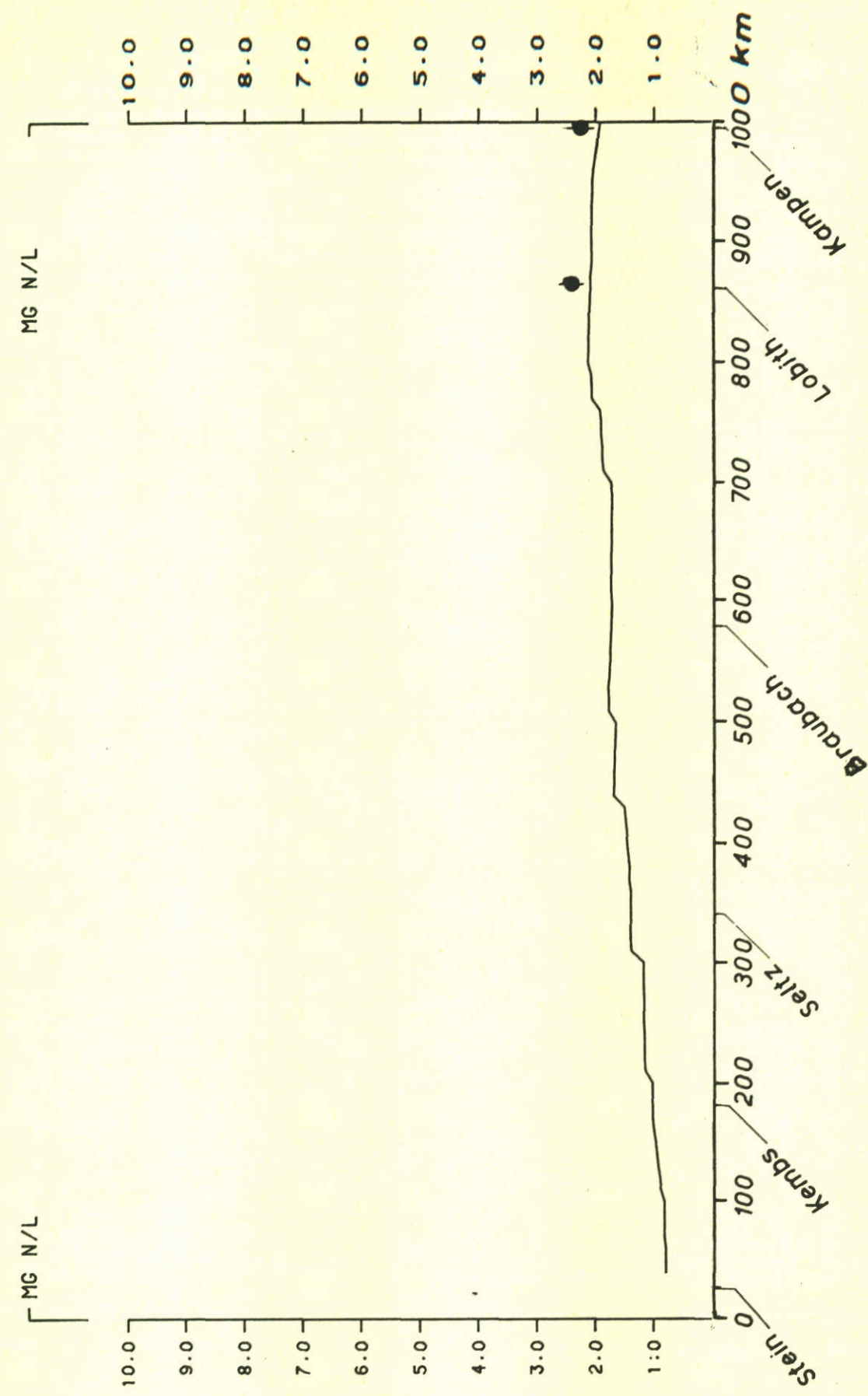
CHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/IJSSEL 1977



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(COD)

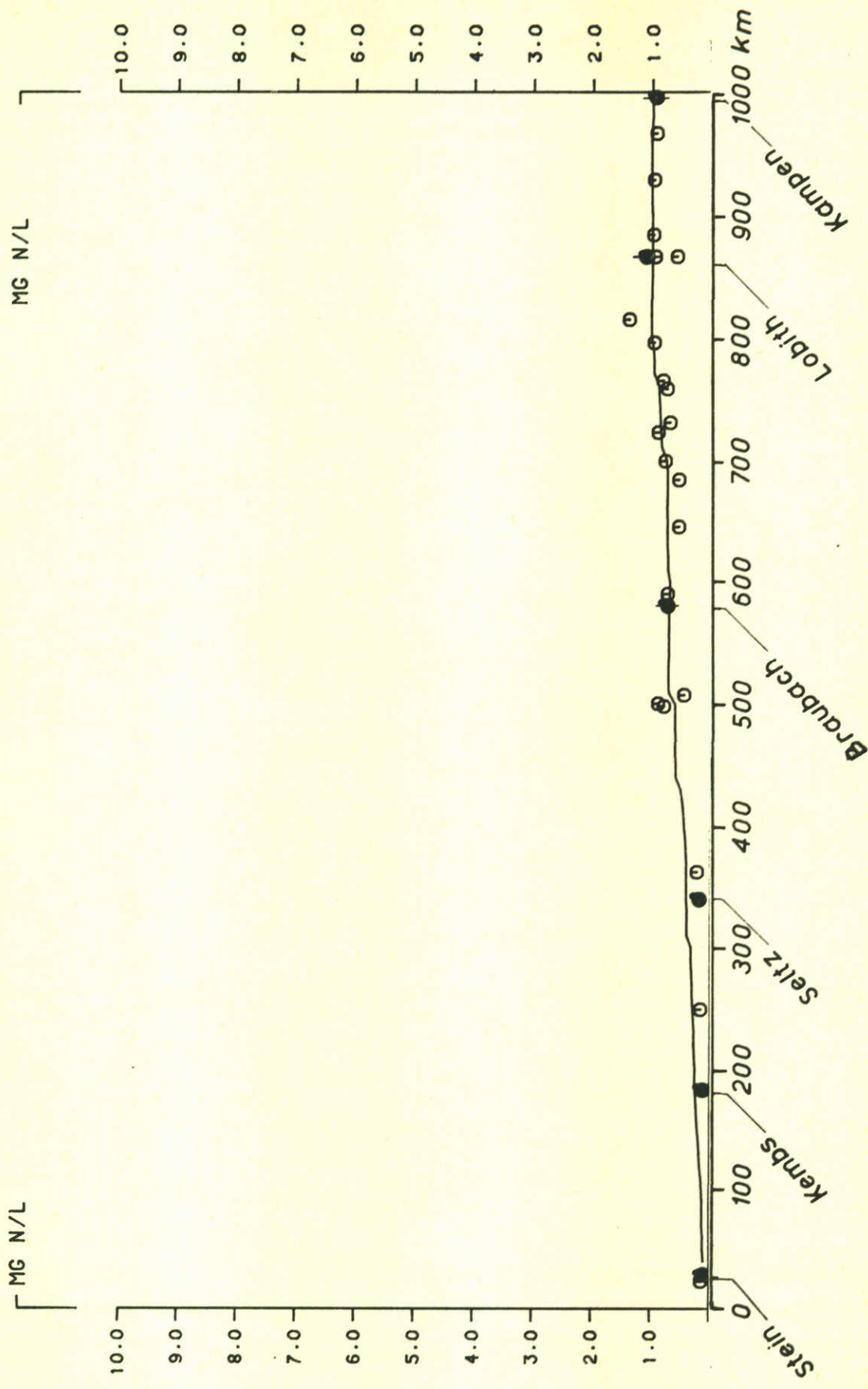
A4

KJELDAHL-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



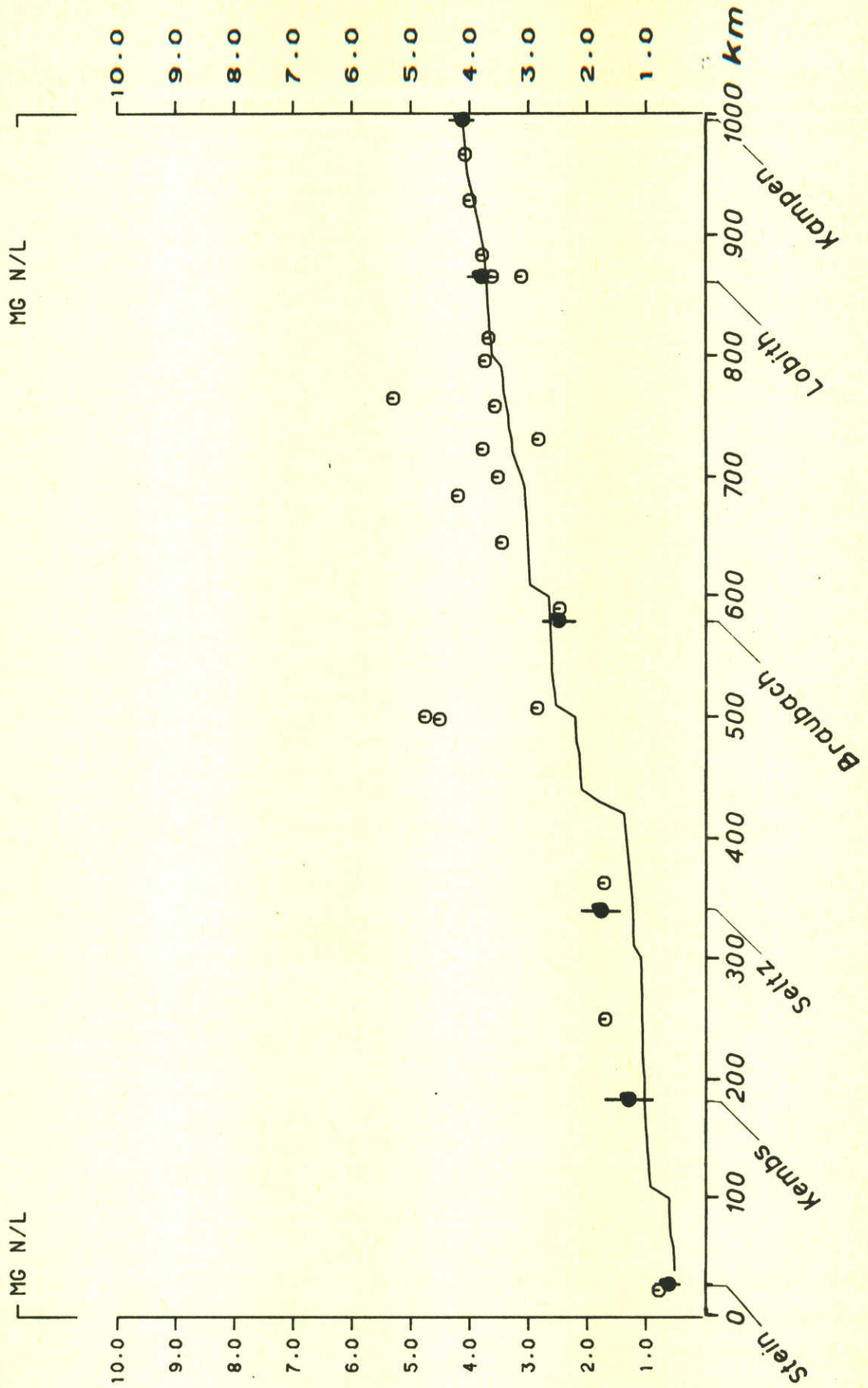
Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(Kjd-N)

AMMONIUM-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(NH<sub>4</sub>-N)

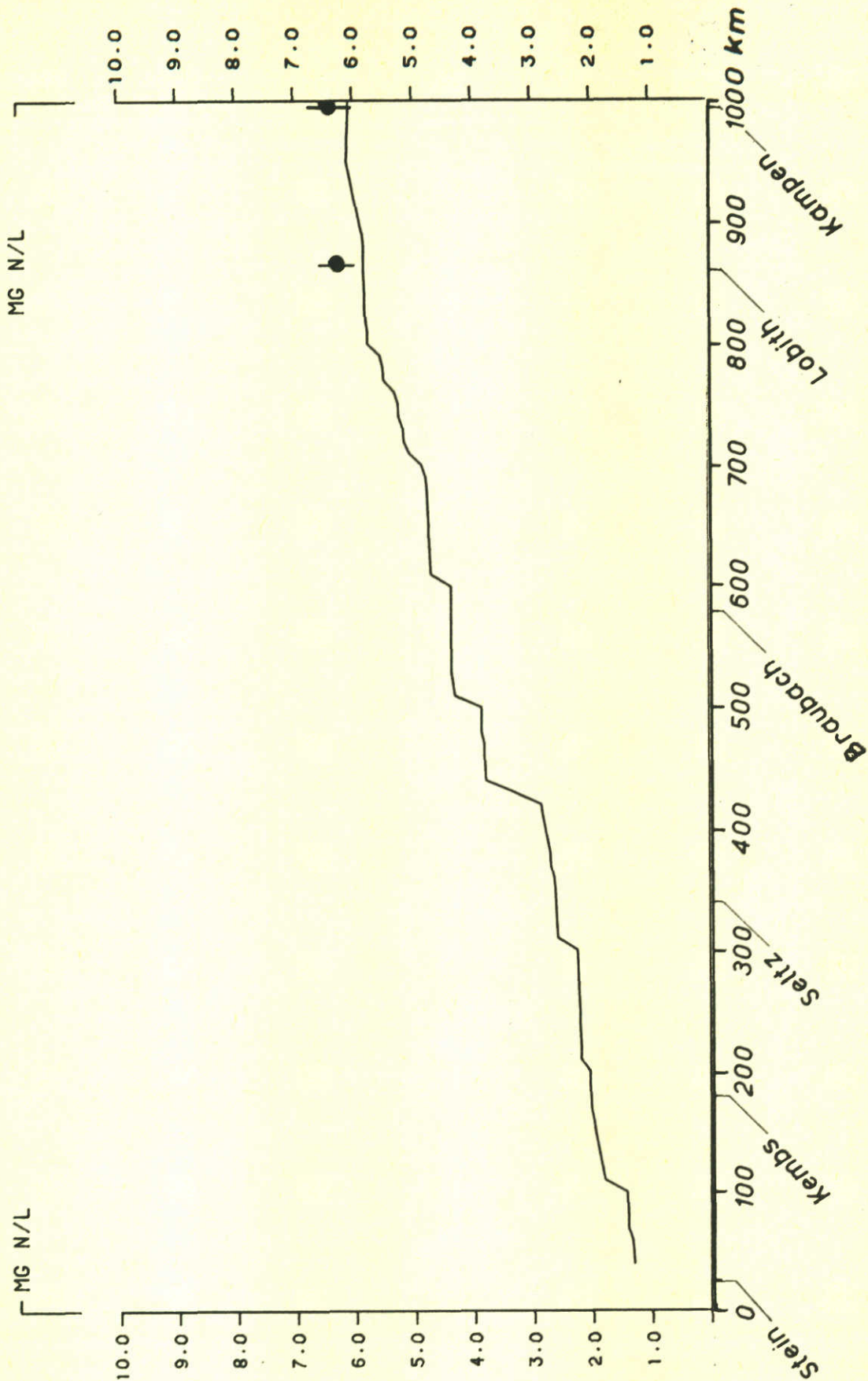
NITRAAT-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977

(NO<sub>3</sub>-N)

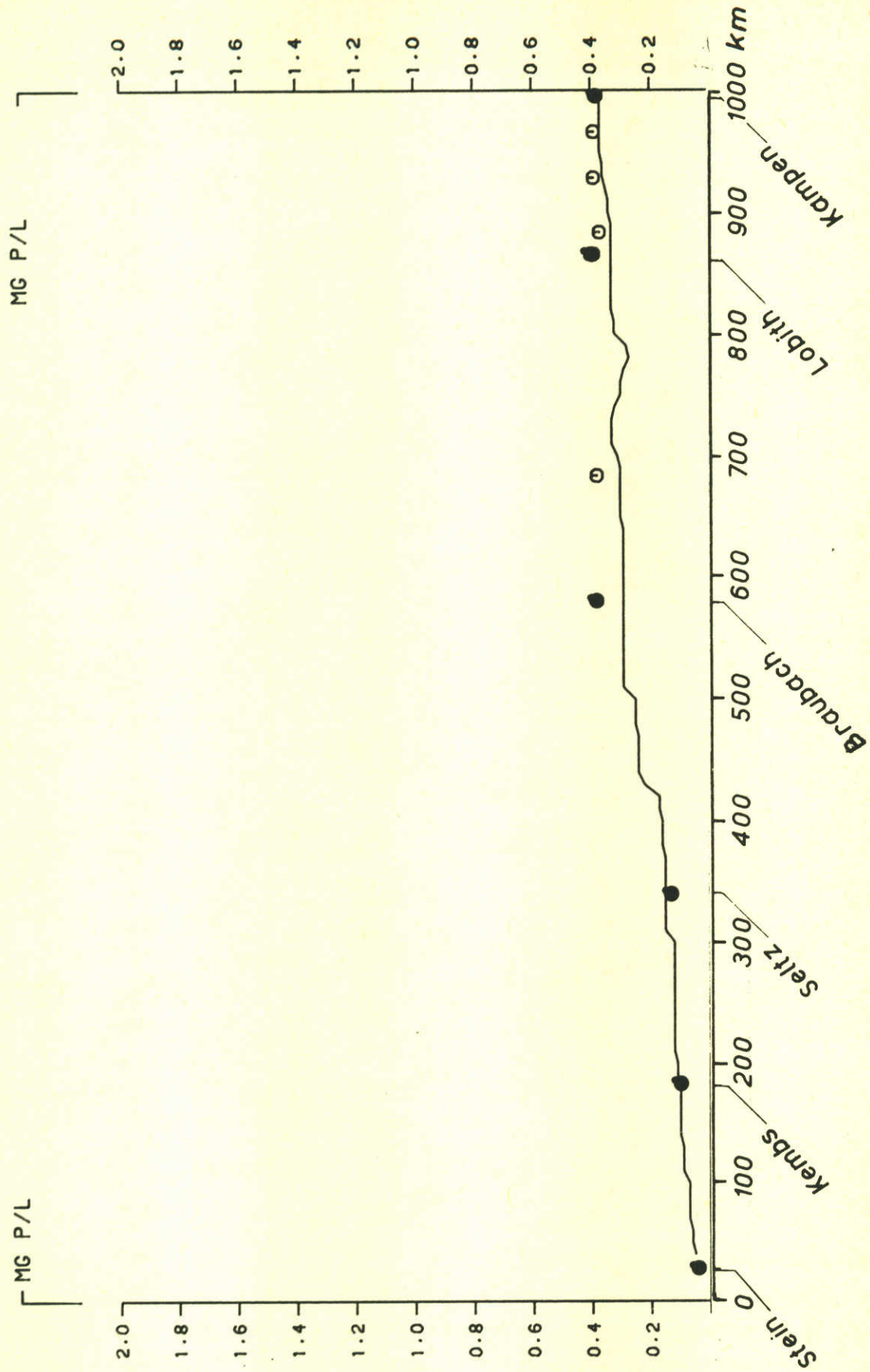
TOTAAL-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977 (totaal-N)

RIJN/IJSSEL 1977

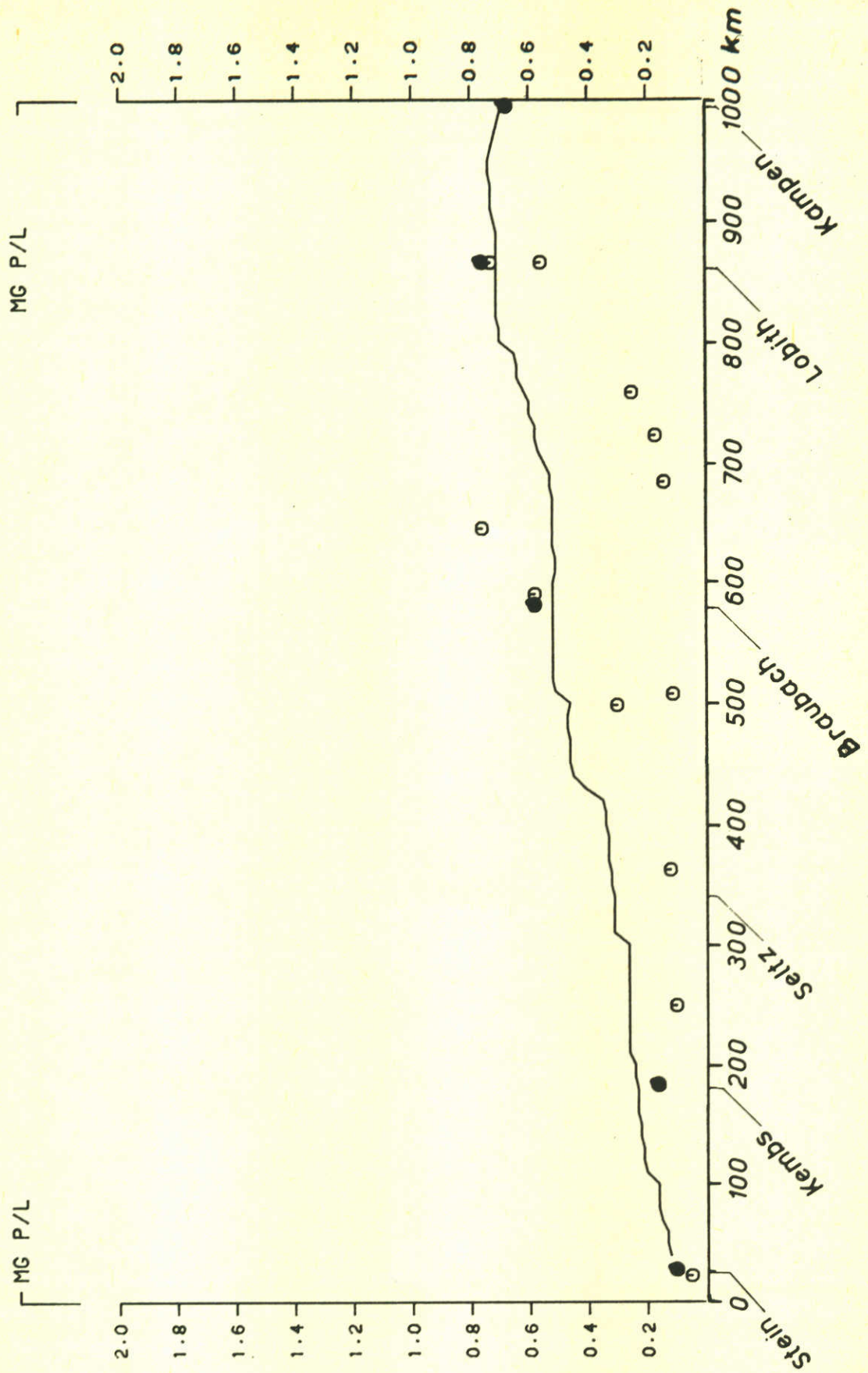
ORTHO-FOSFAAT



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(ortho-P)

RIJN/IJSSEL 1977

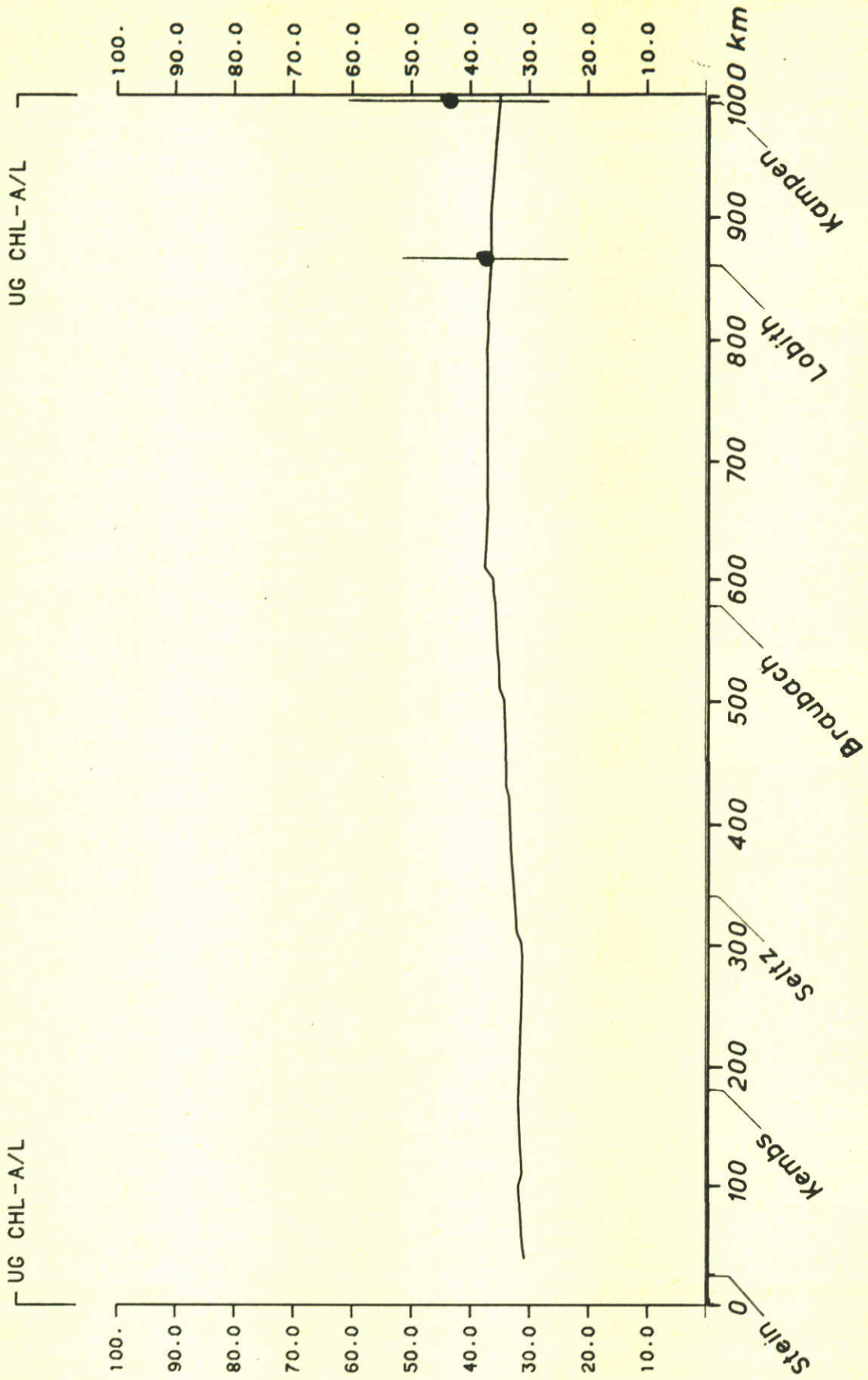
TOTAAL-FOSFAAT



Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(totaal-P)

RIJN/IJSSEL 1977

ALGEN



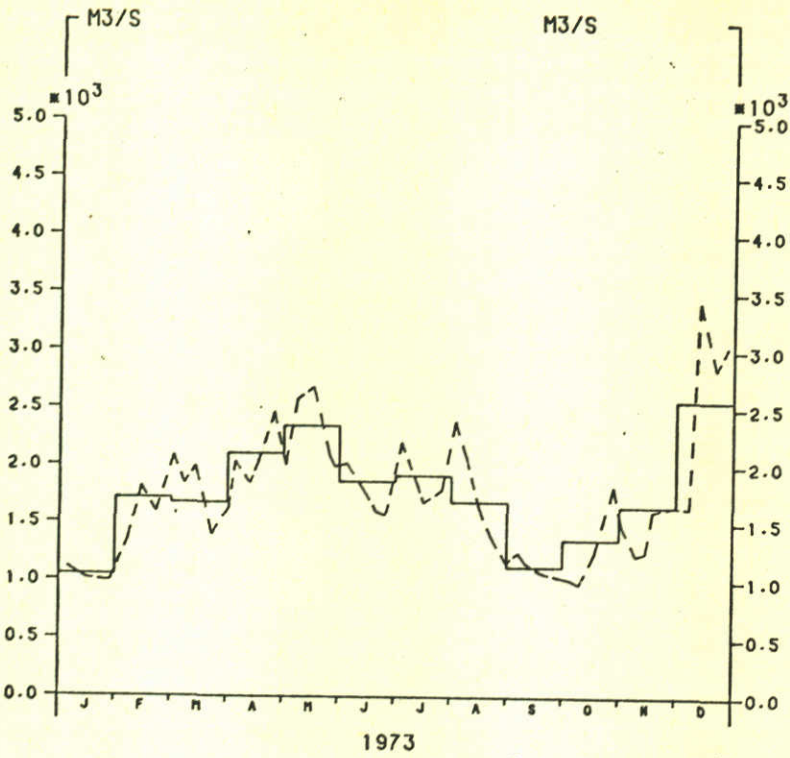
Modelverifikatie op basis van het jaargemiddelde 1977  
(algen)

A4



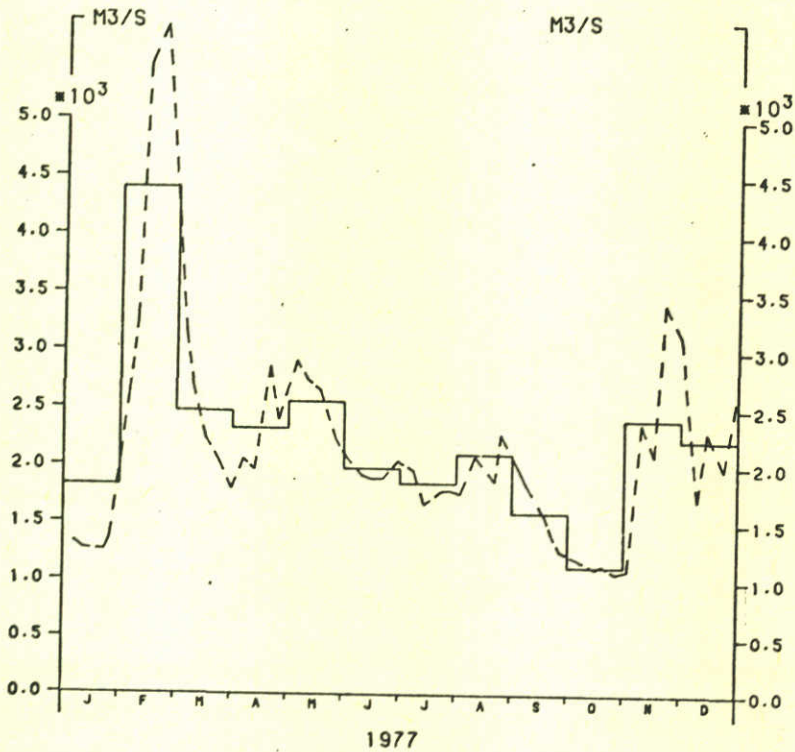
DEBIET

LOBITH 1973



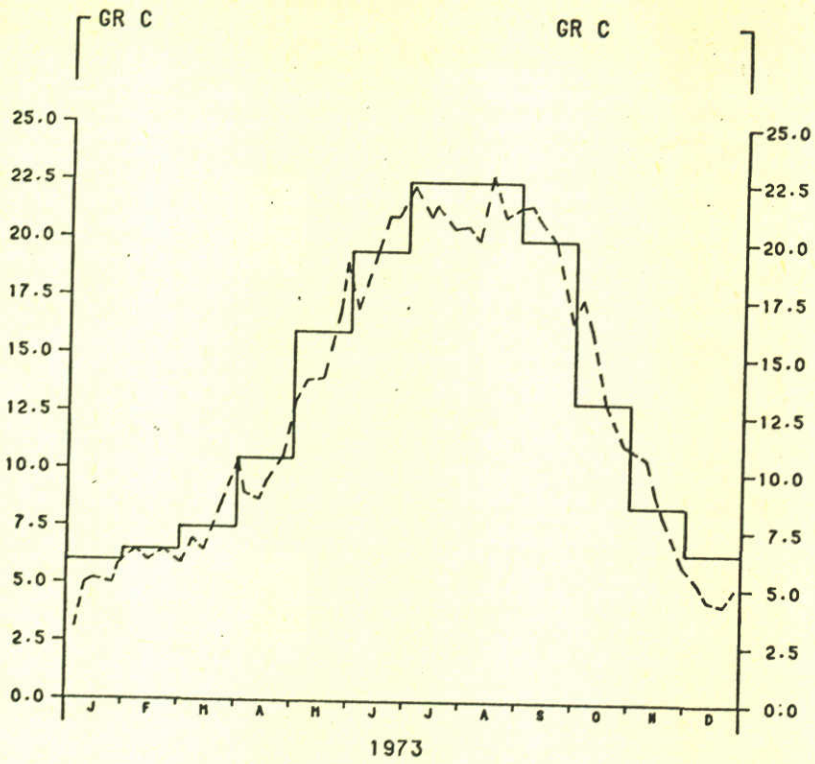
DEBIET

LOBITH 1977

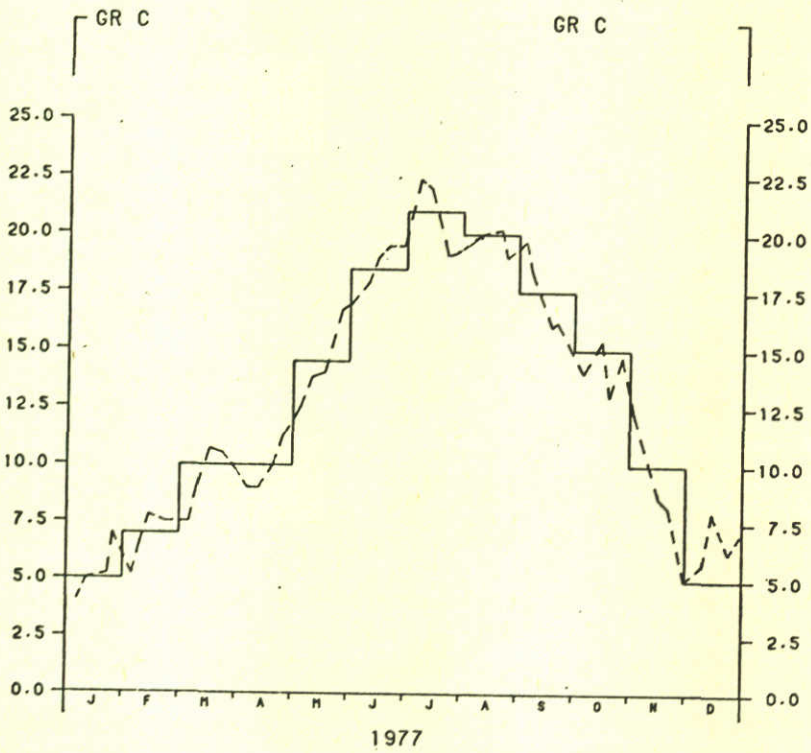


Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (afvoer)

TEMPERATUUR LOBITH 1973

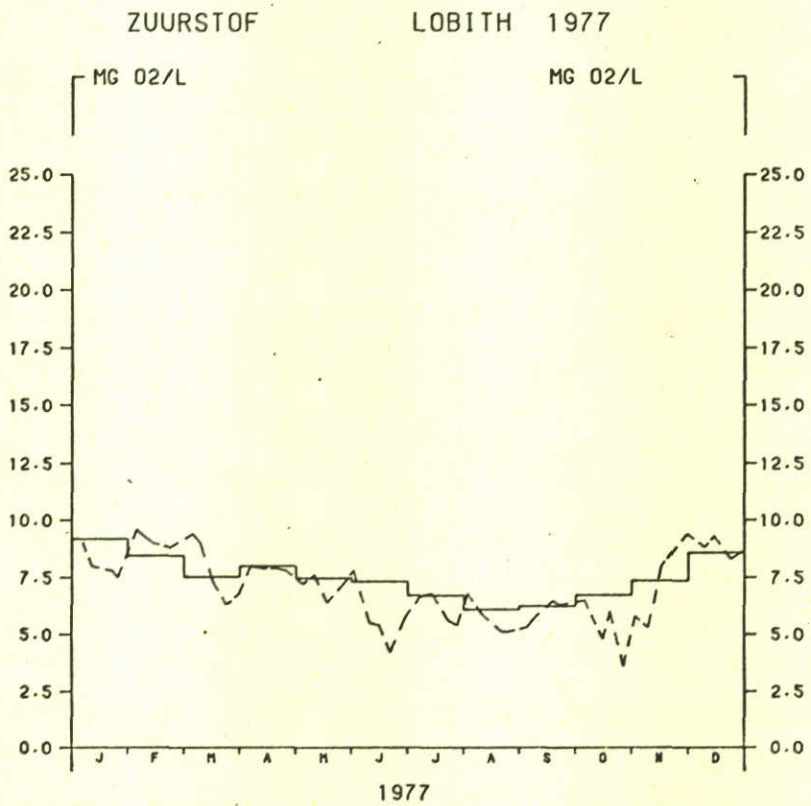
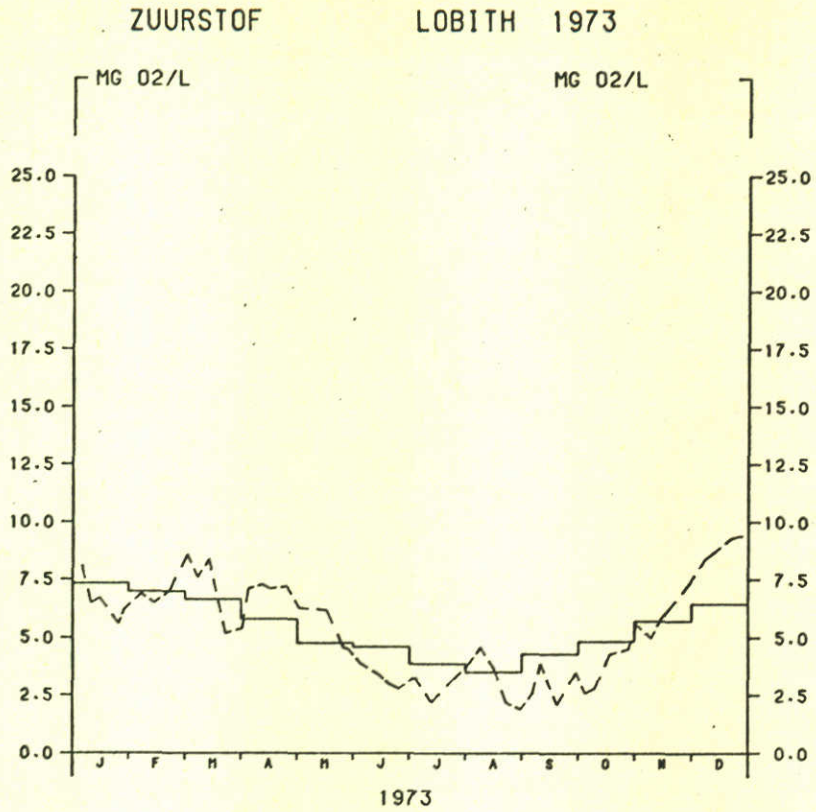


TEMPERATUUR LOBITH 1977



Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (temperatuur)

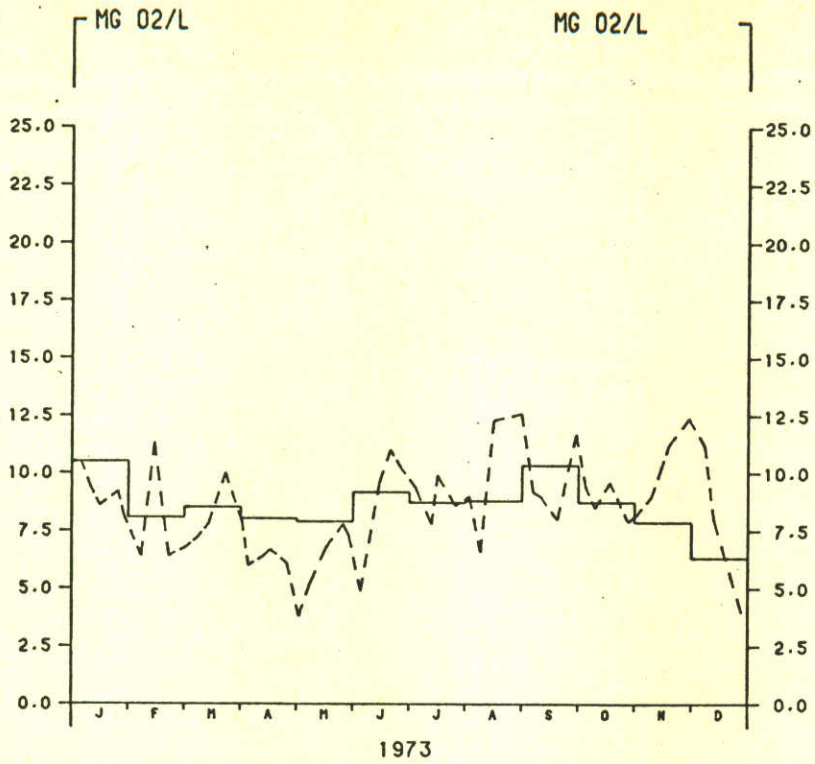
A4



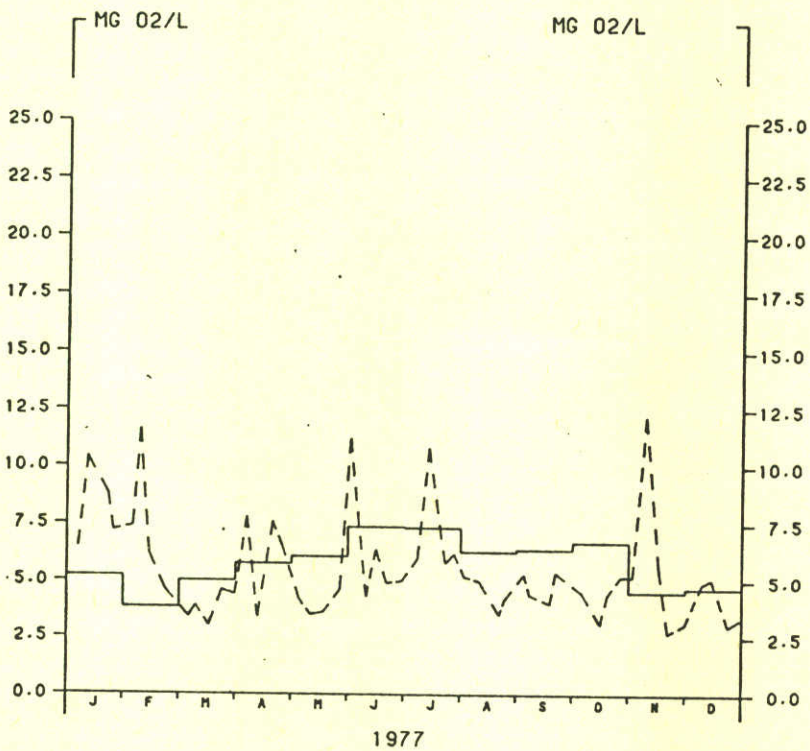
Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te  
Lobith (zuurstof)

A4

BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. LOBITH 1973



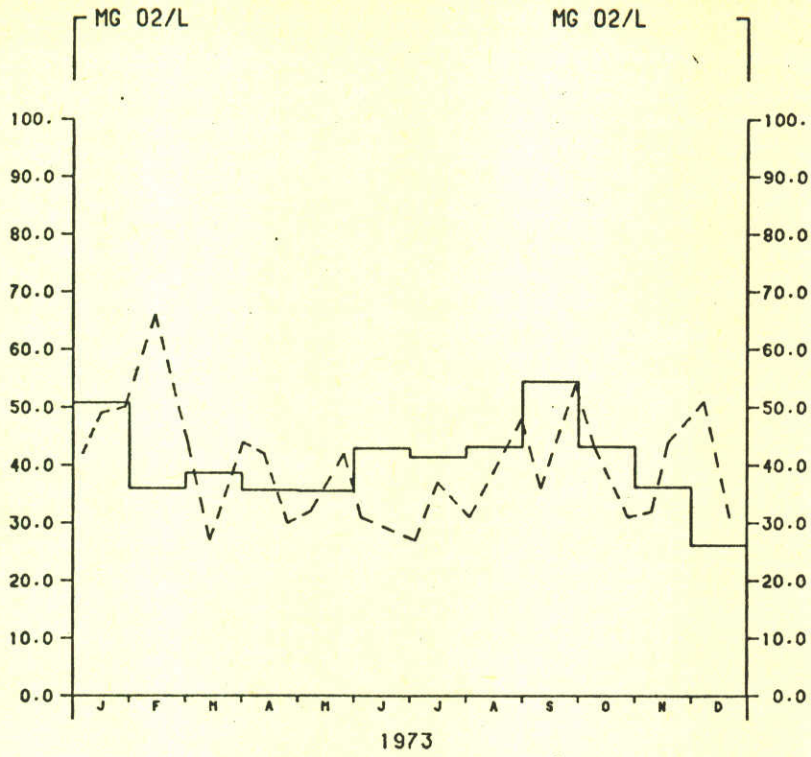
BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. LOBITH 1977



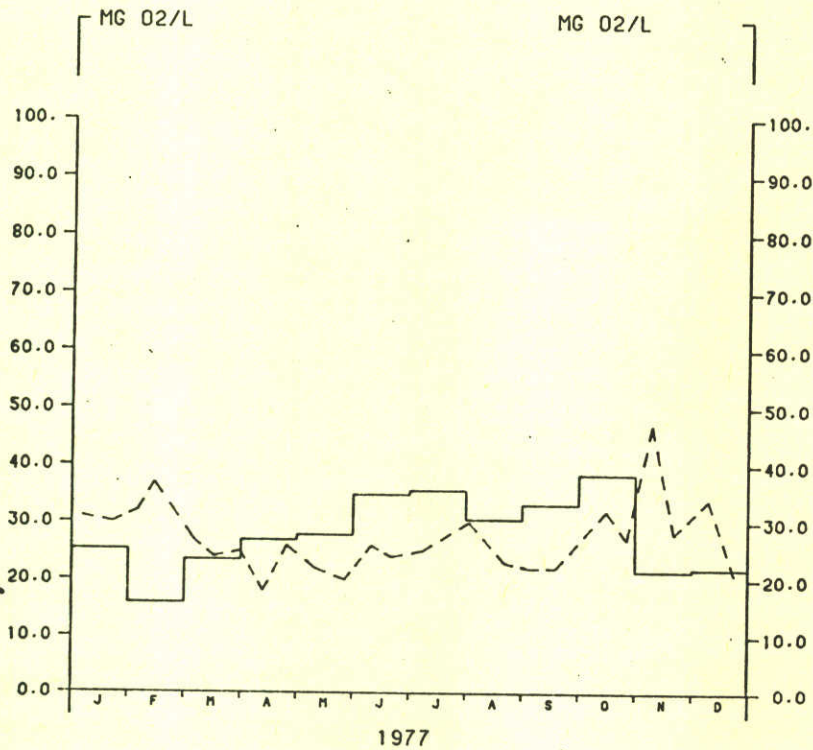
Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te  
Lobith (BOD<sub>5</sub>)

A4

CHEM. ZUURSTOFVERBR. LOBITH 1973



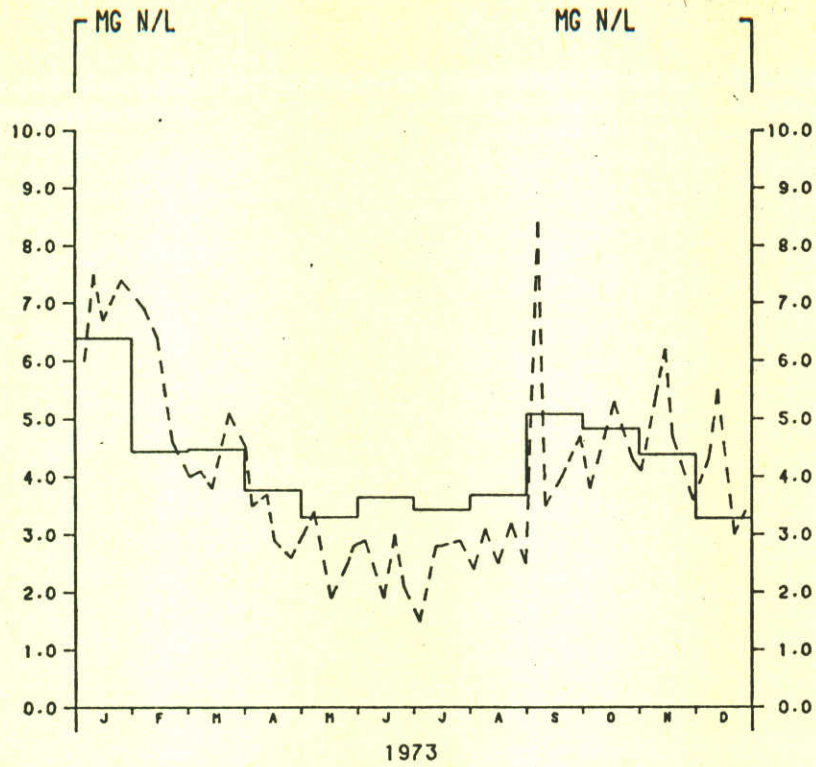
CHEM. ZUURSTOFVERBR. LOBITH 1977



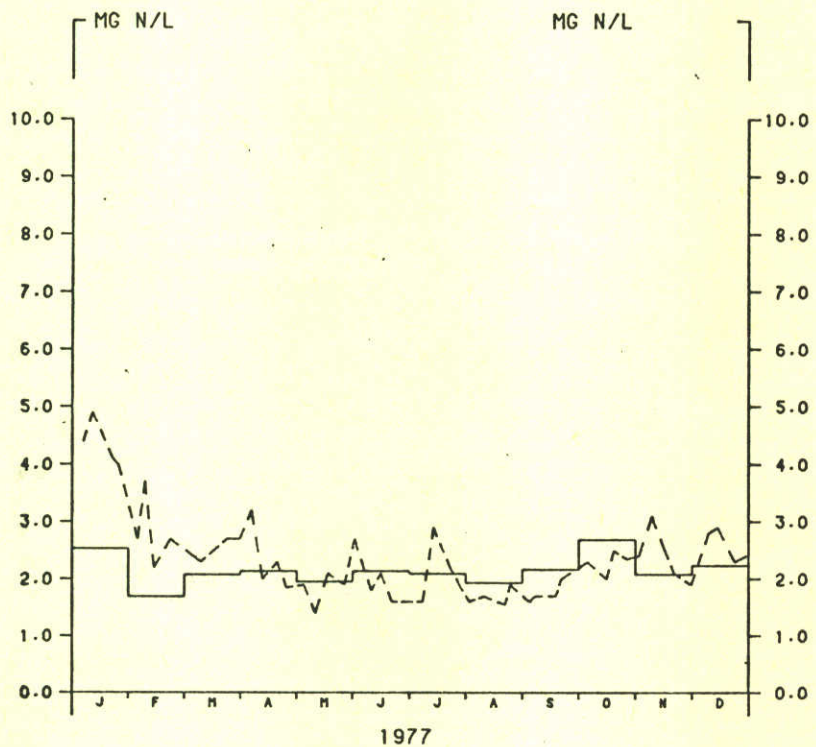
Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (COD)

A4

KJELDAHL-STIKSTOF LOBITH 1973



KJELDAHL-STIKSTOF LOBITH 1977

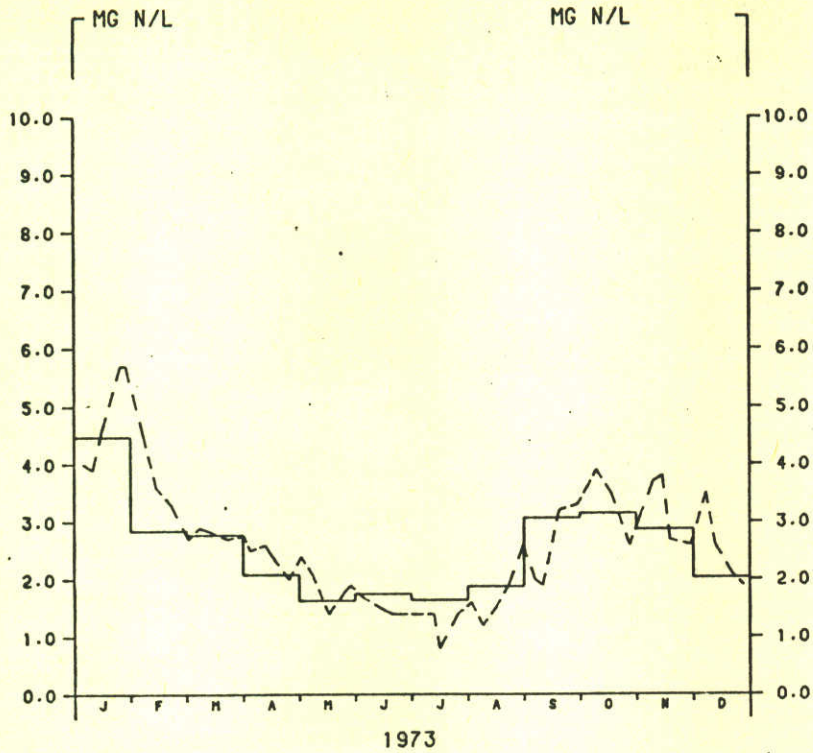


Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith (Kjd-N)

A4

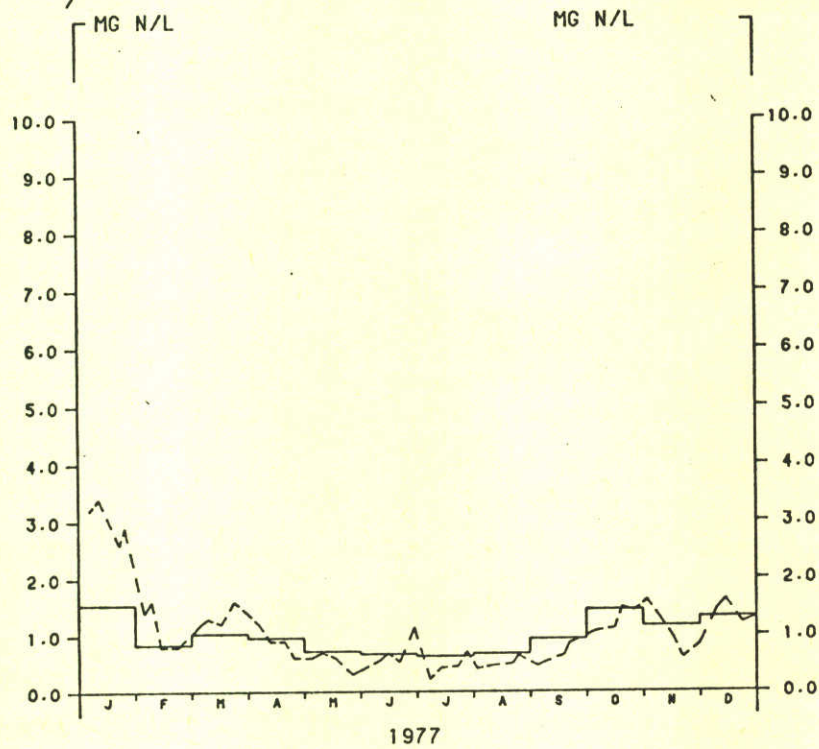
AMMONIUM-STIKSTOF

LOBITH 1973



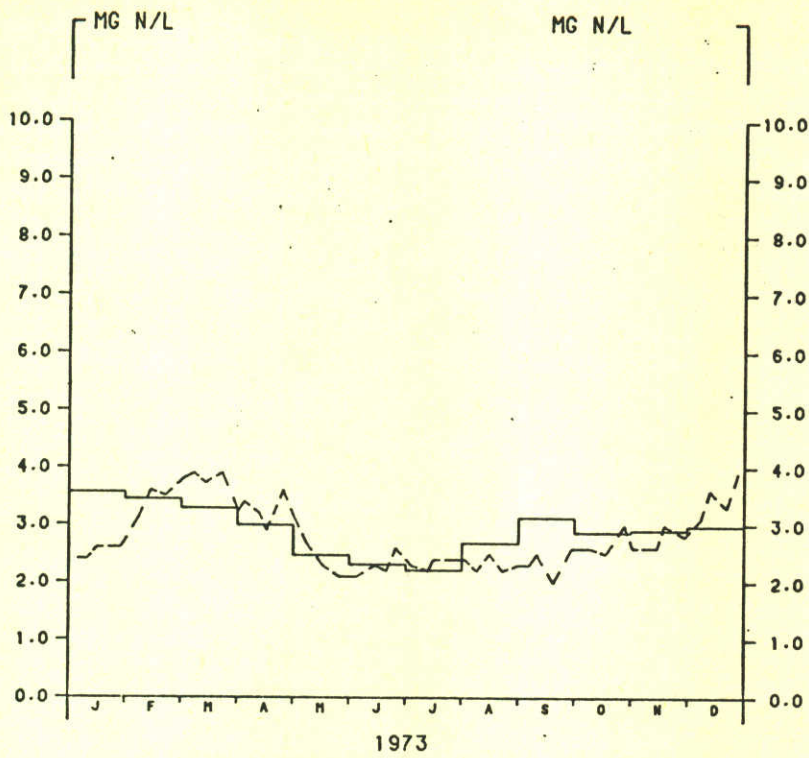
AMMONIUM-STIKSTOF

LOBITH 1977

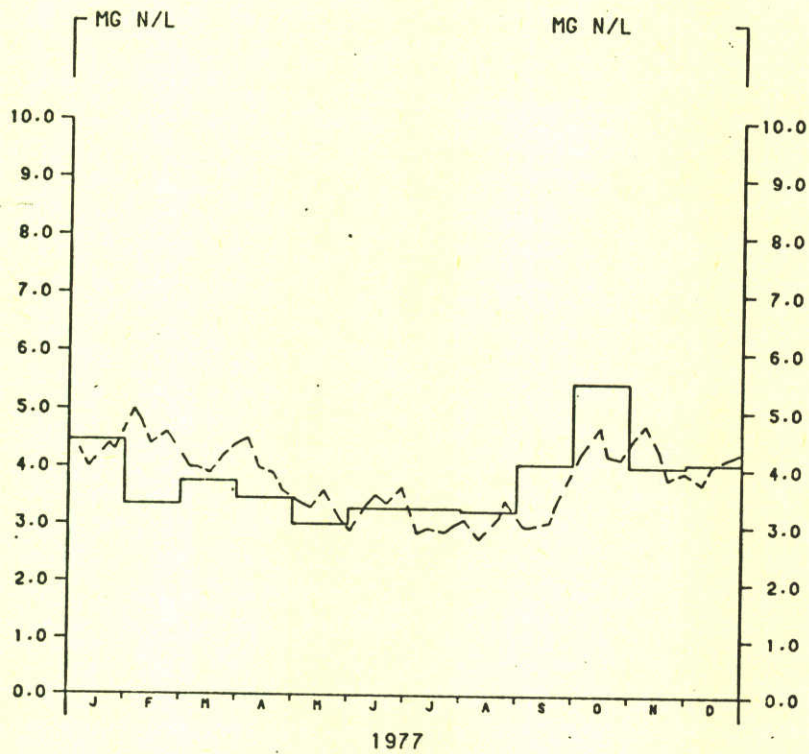


Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te  
Lobith (NH<sub>4</sub>-N)

NITRAAT-STIKSTOF LOBITH 1973



NITRAAT-STIKSTOF LOBITH 1977



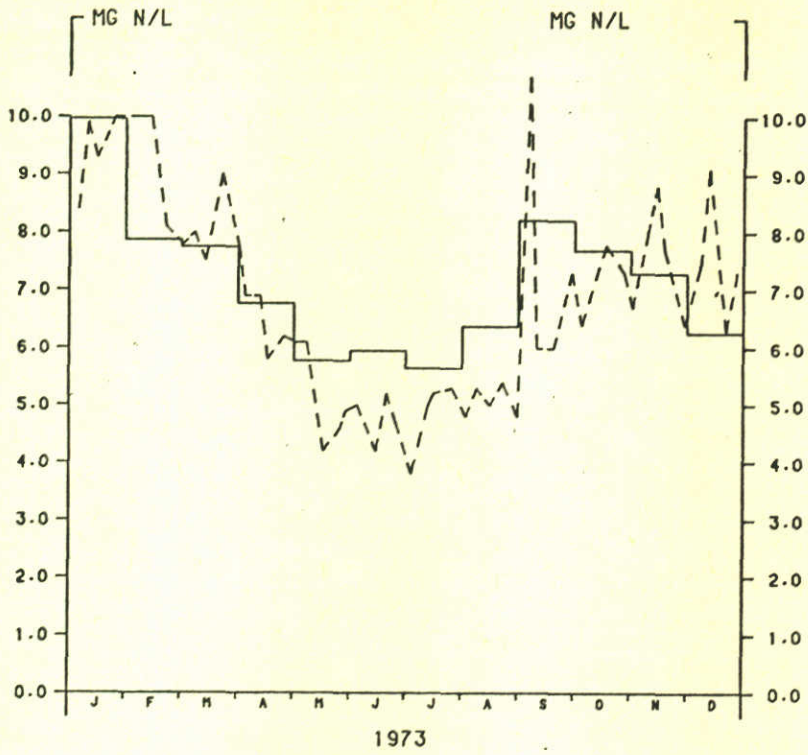
Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te Lobith ( $\text{NO}_3\text{-N}$ )

A4



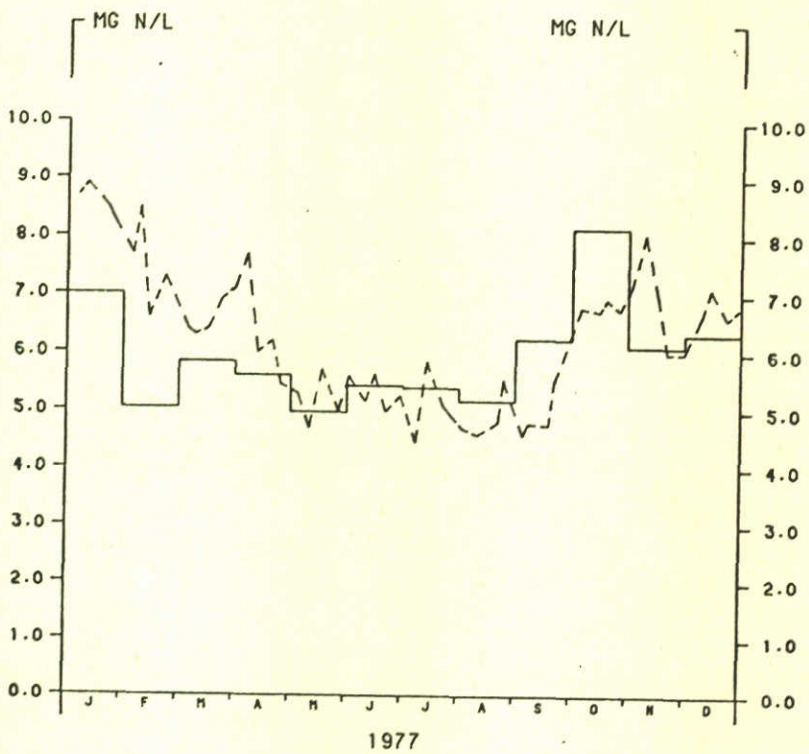
TOTAAL-STIKSTOF

LOBITH 1973



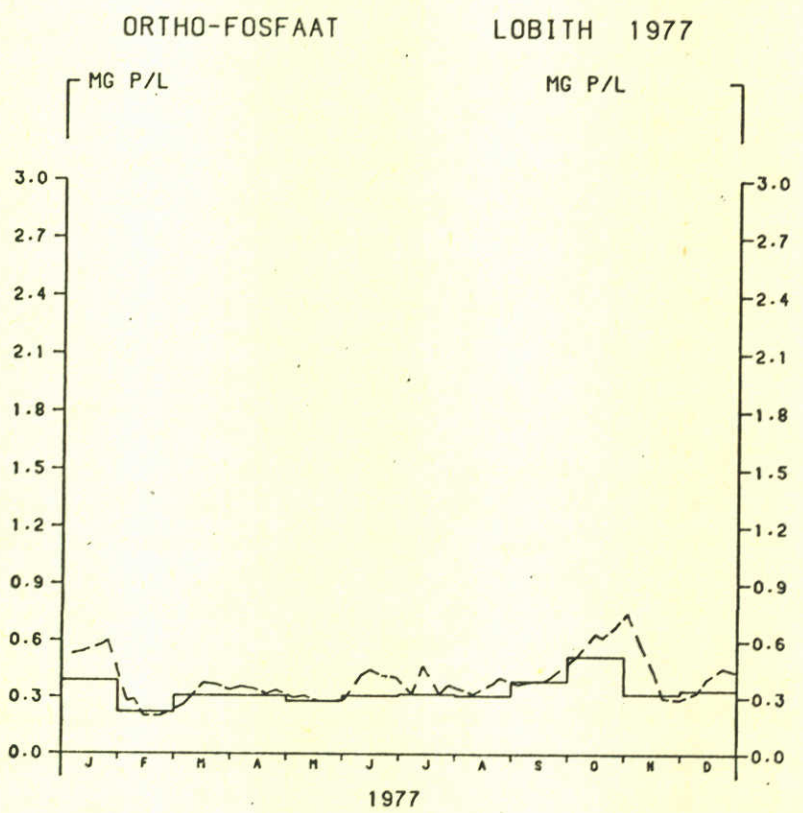
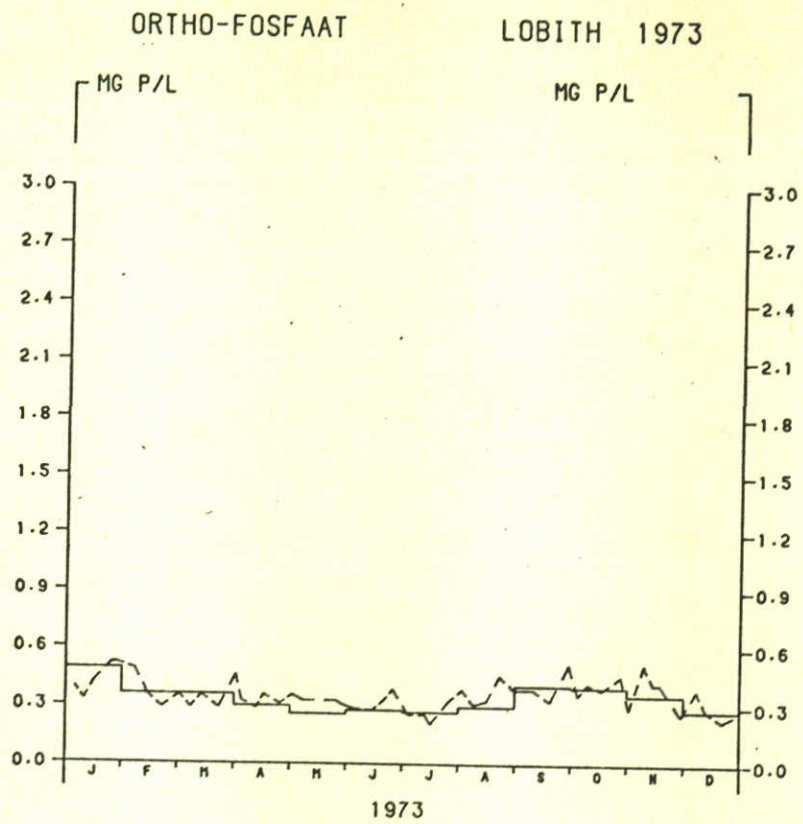
TOTAAL-STIKSTOF

LOBITH 1977

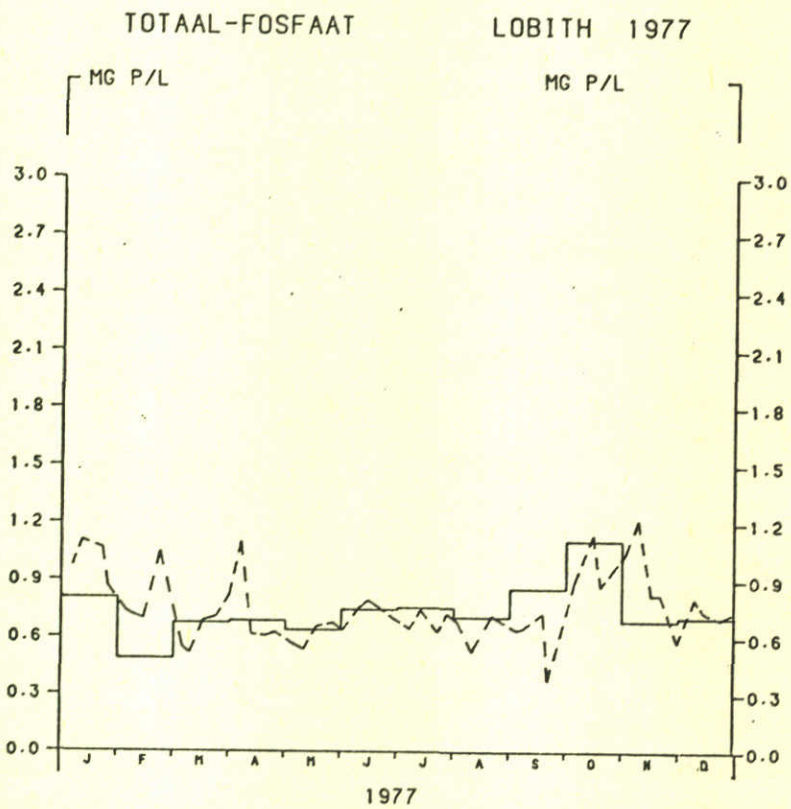
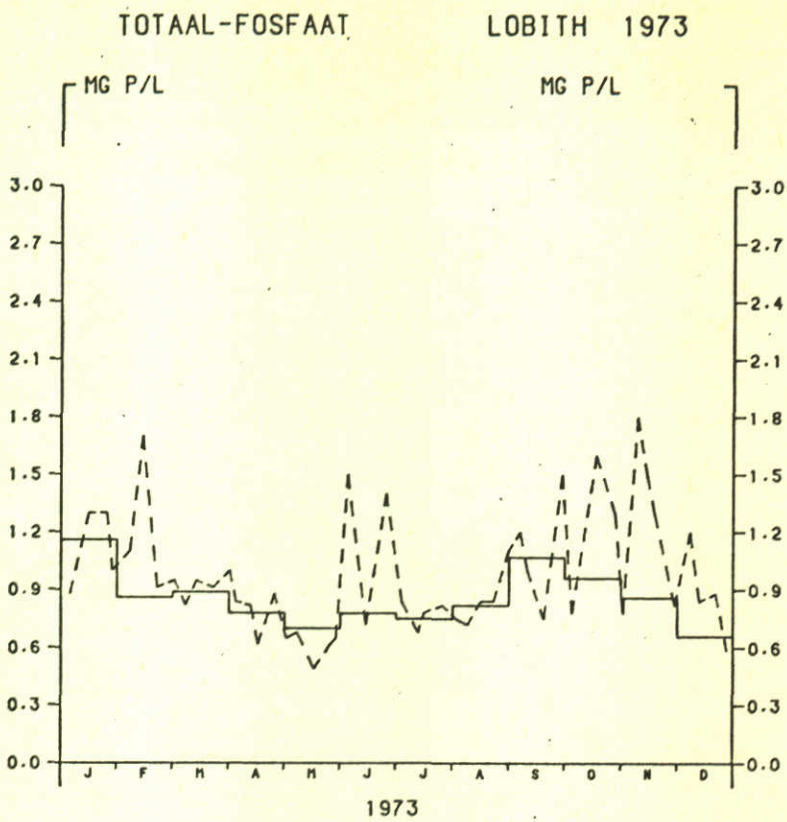


Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te  
Lobith (totaal-N)

A4



Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te  
Lobith (ortho-P)

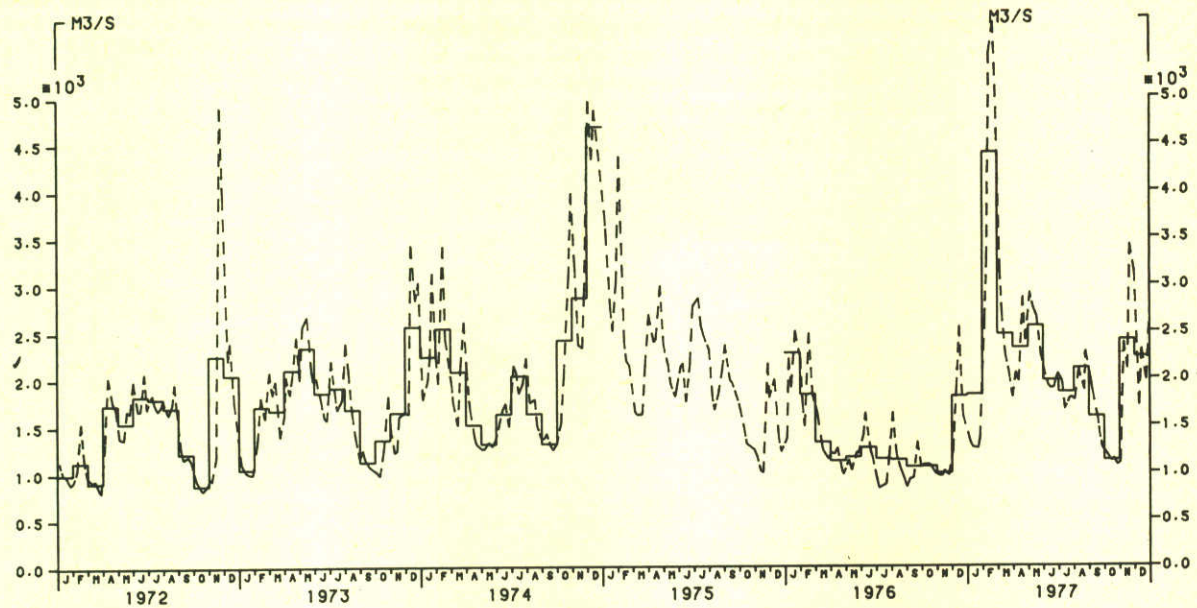


Maandgemiddelde modelsimulatie voor 1973 en 1977 te  
Lobith (totaal-P)



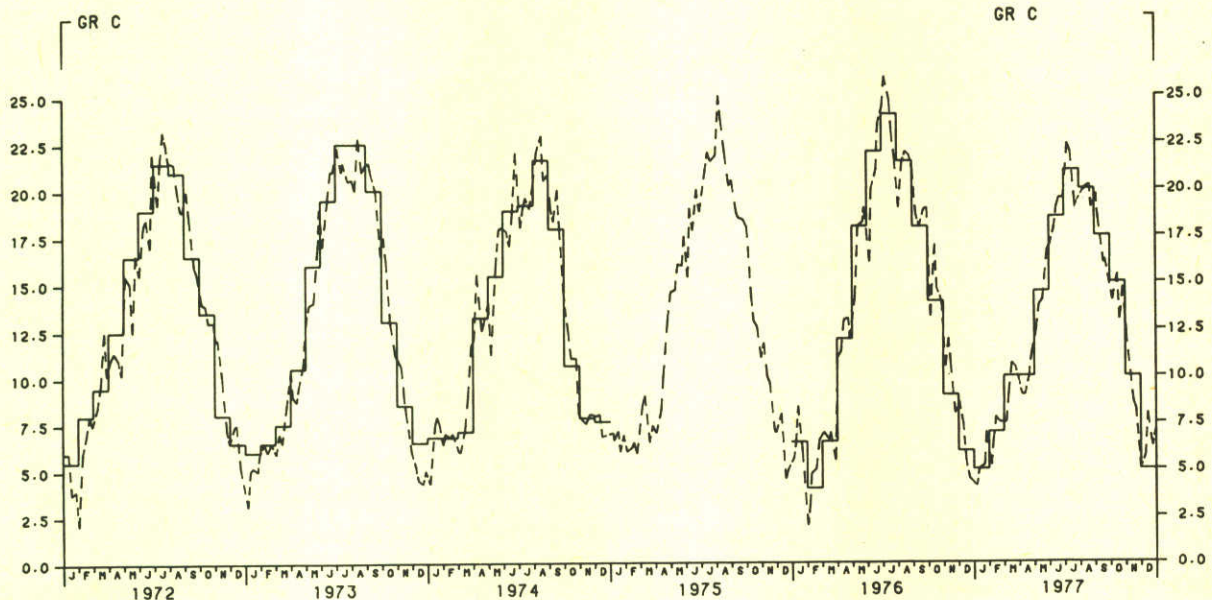
DEBIET

LOBITH 1972 - 1977



TEMPERATUUR

LOBITH 1972 - 1977



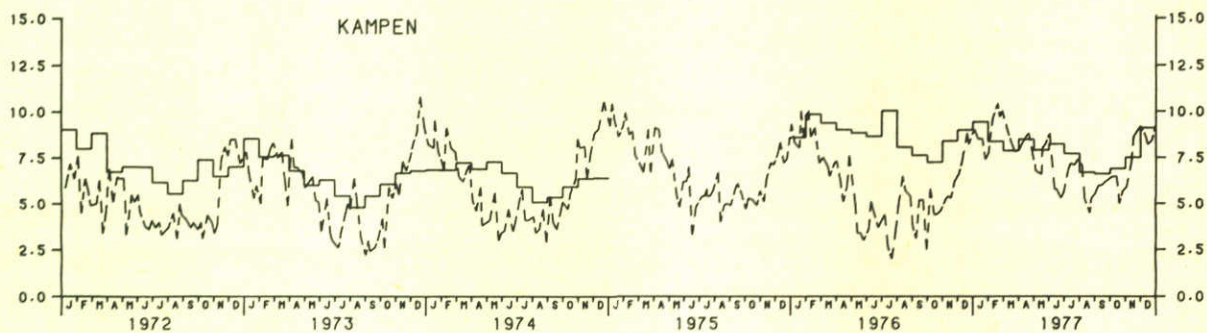
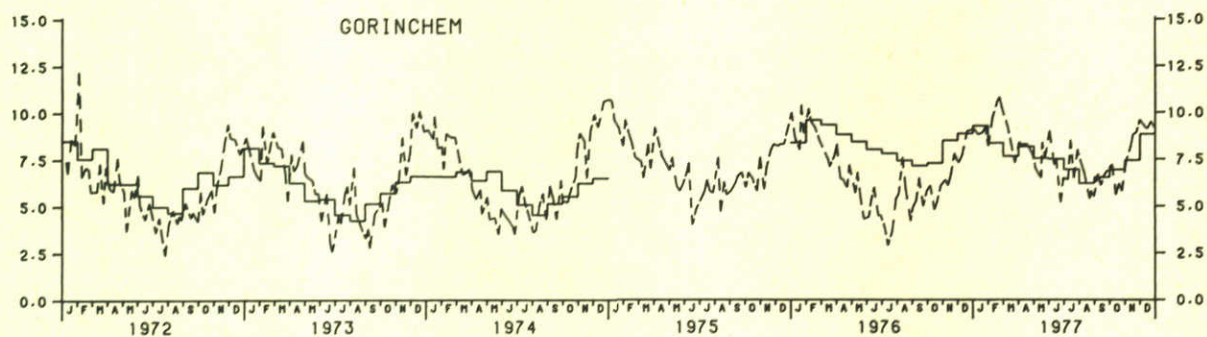
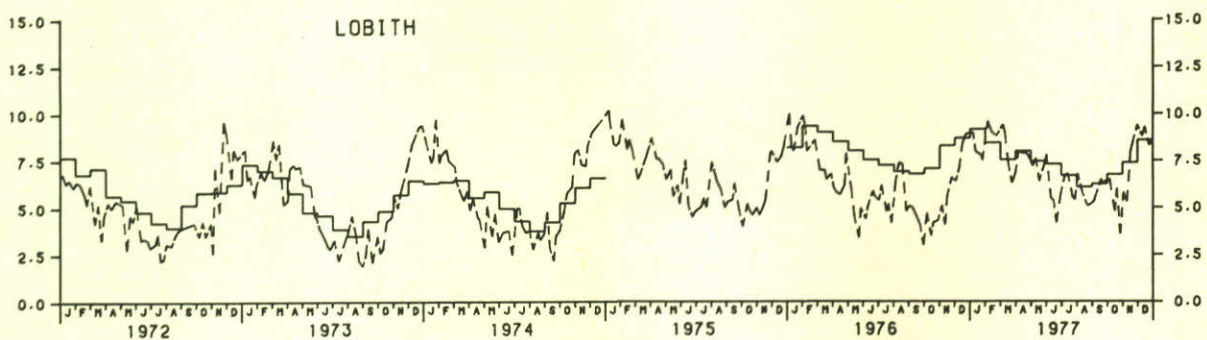
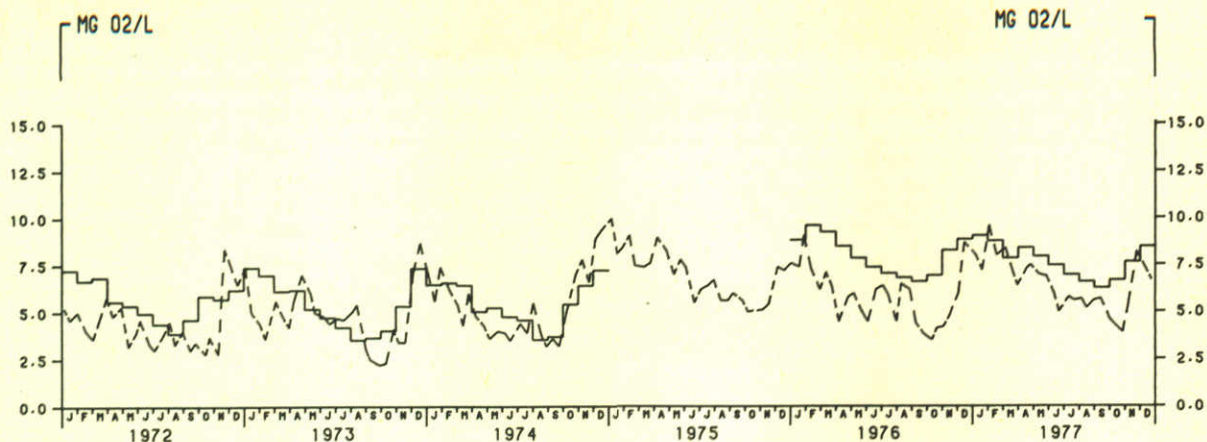
maandgemiddelde simulaties 1972-1977

Lobith (debiet, temperatuur)

A4

ZUURSTOF

BRAUBACH 1972 - 1977

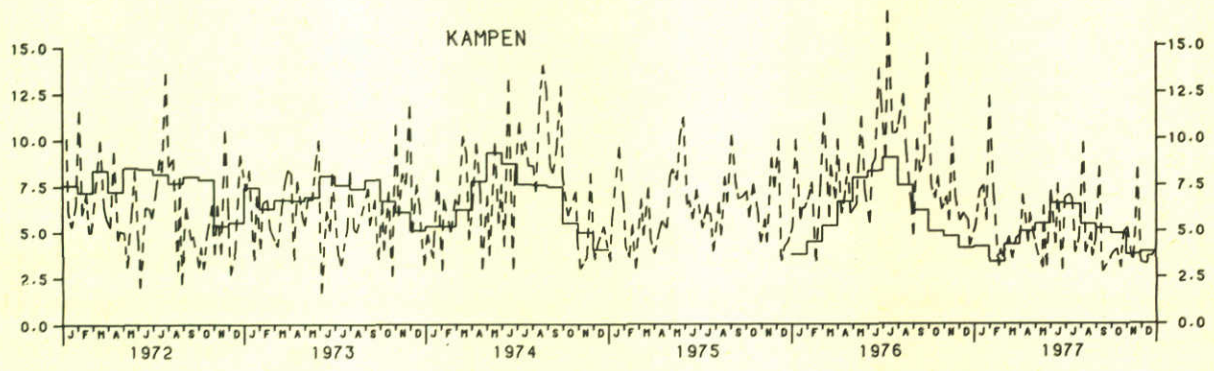
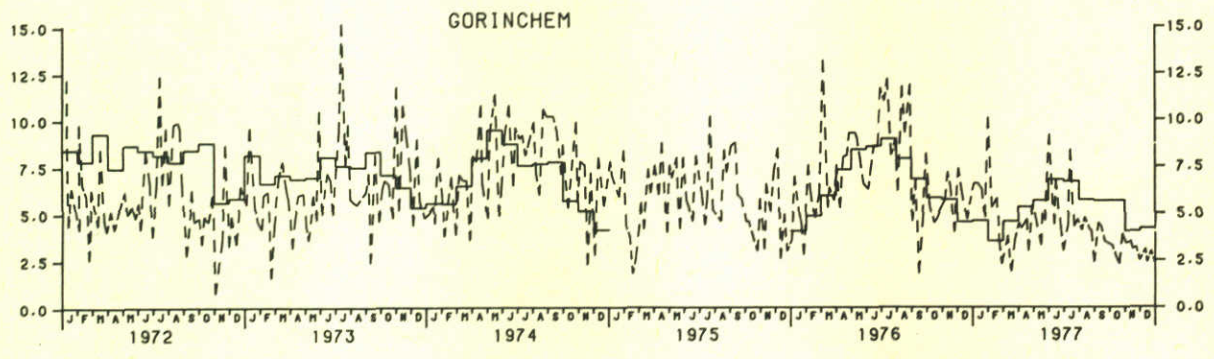
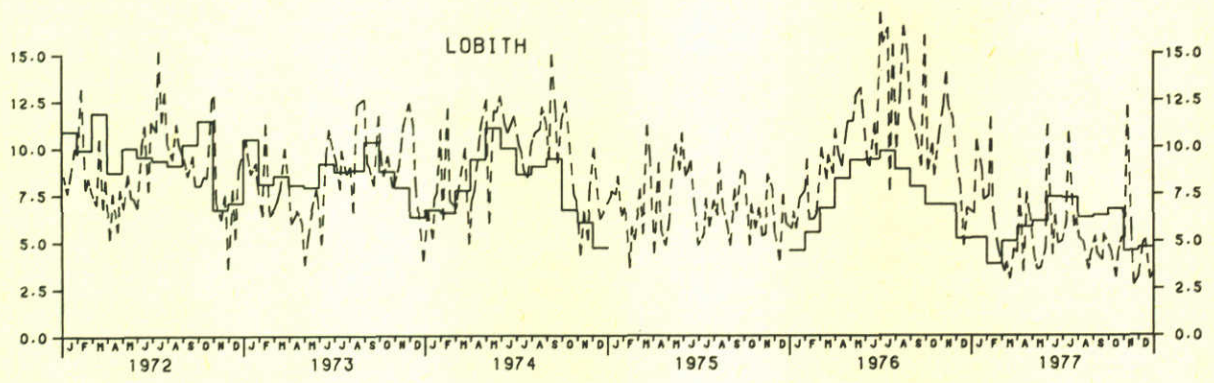
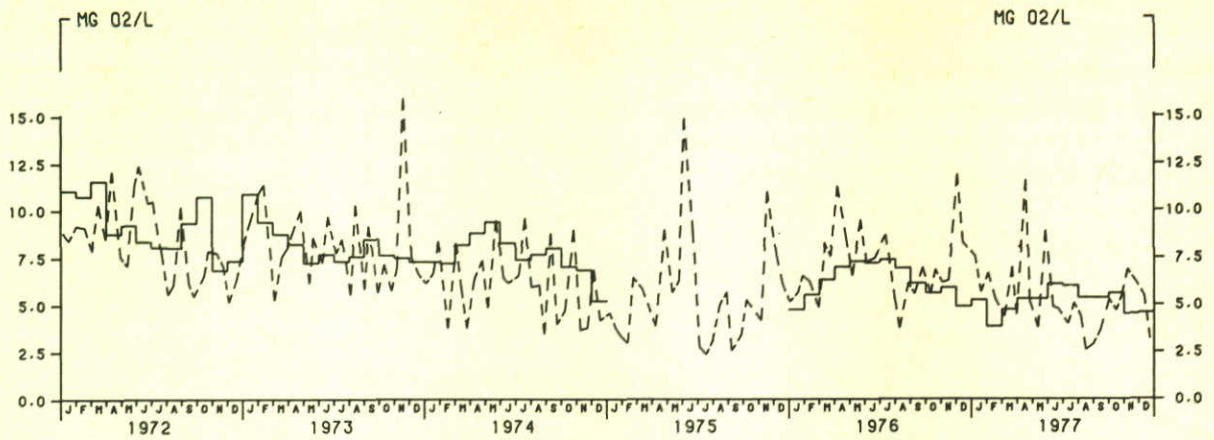


maandgemiddelde simulaties 1972-1977

Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (zuurstof)

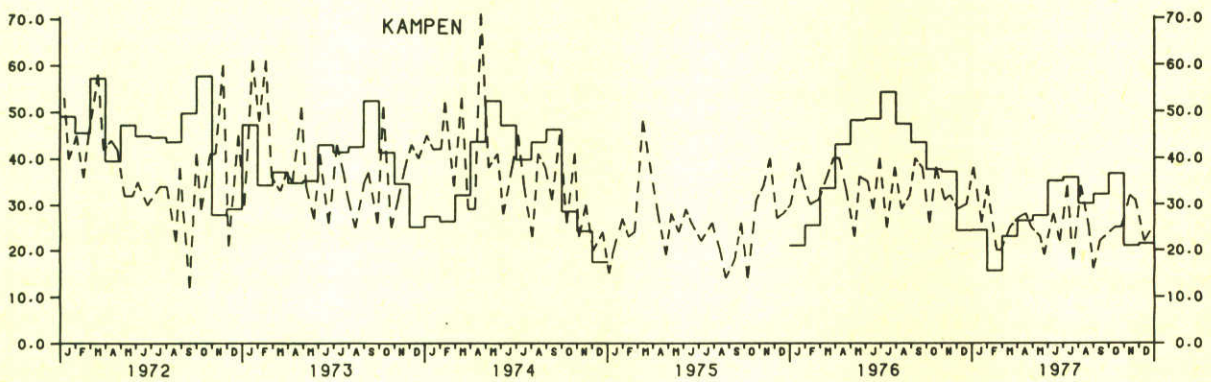
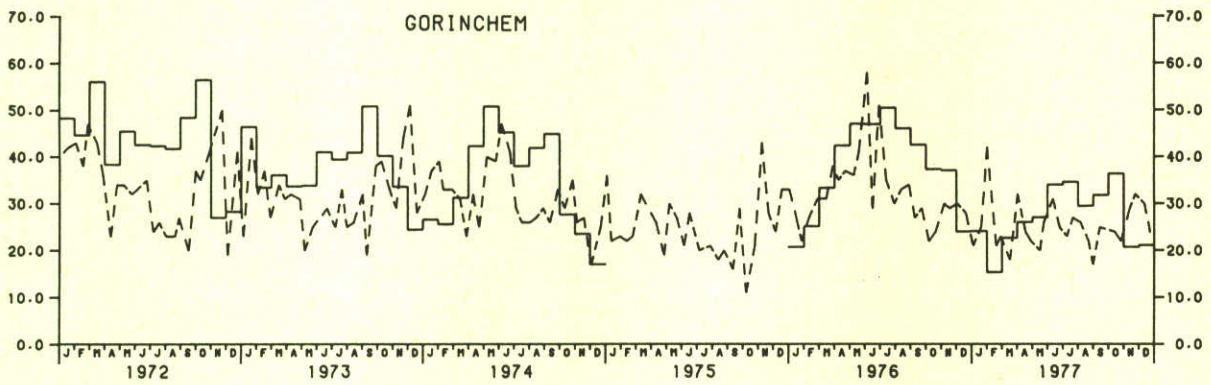
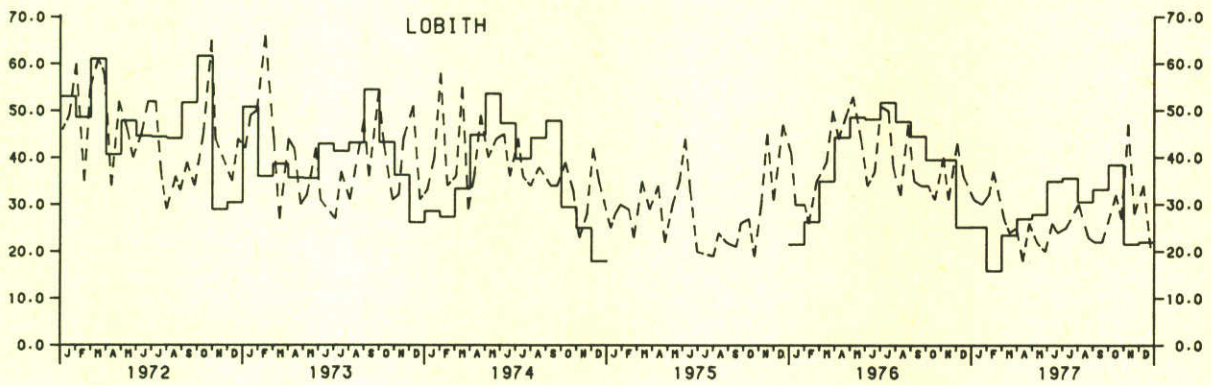
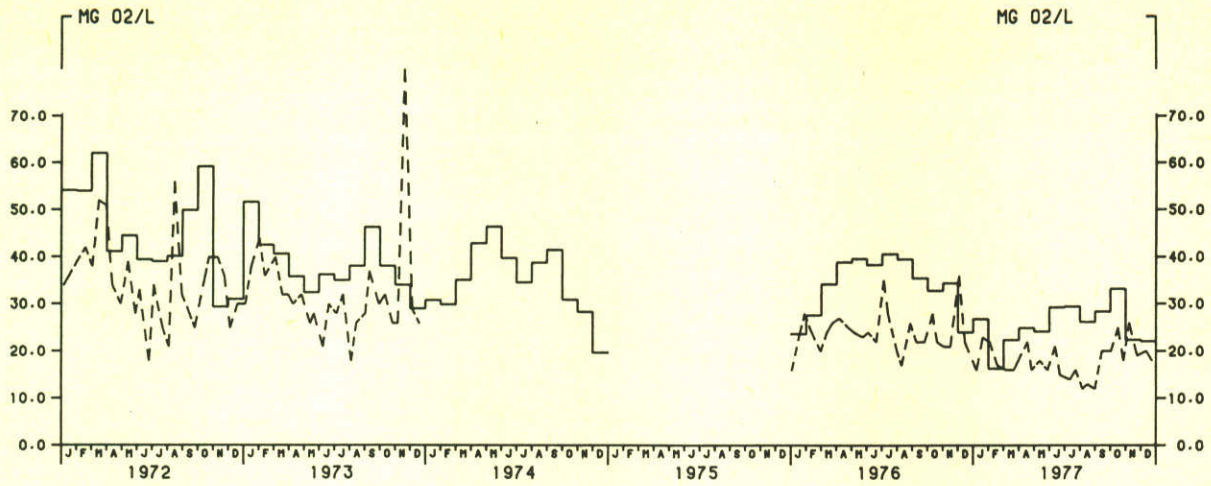
A4

BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. BRAUBACH 1972 - 1977



maandgemiddelde simulaties 1972-1977  
 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (BOD<sub>5</sub>)<sup>20</sup>

CHEM. ZUURSTOFVERBR. BRAUBACH 1972 - 1977

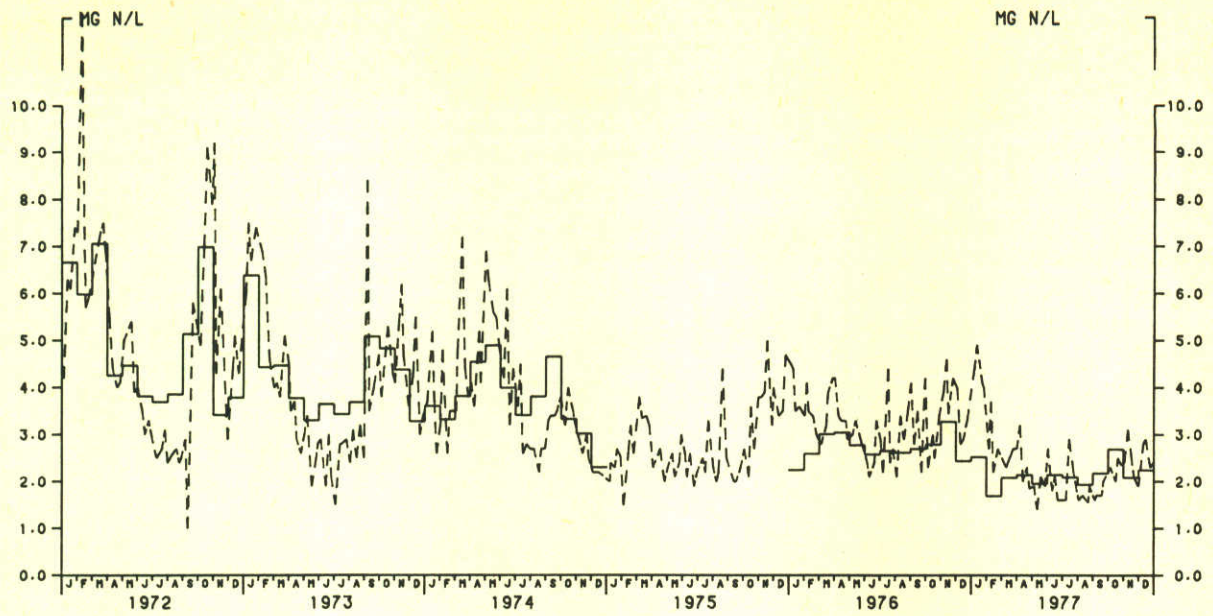


maandgemiddelde simulaties 1972-1977  
 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (COD)

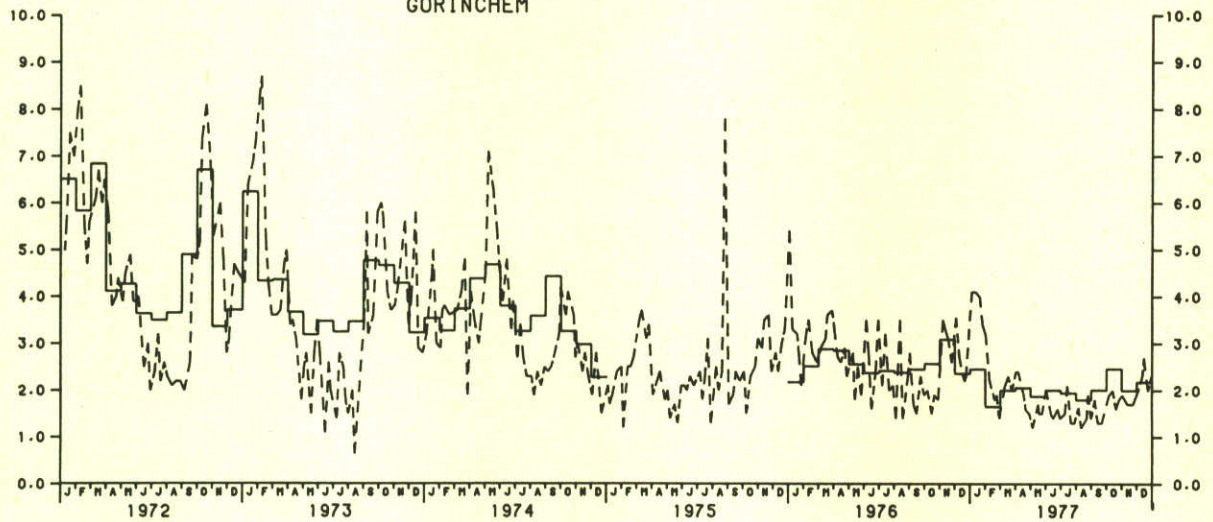
A4



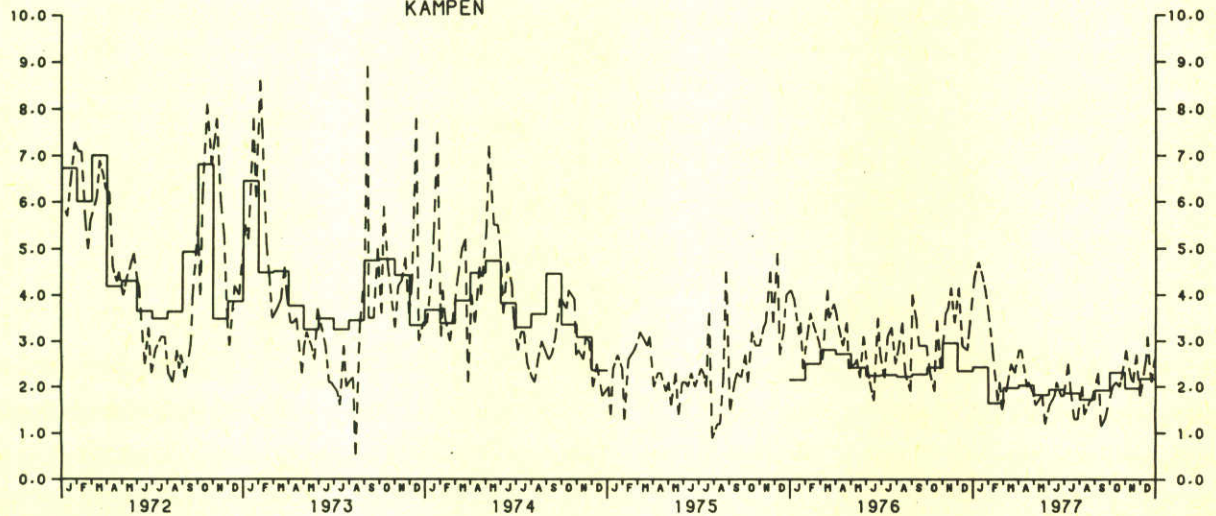
KJELDAHL-STIKSTOF LOBITH 1972 - 1977



GORINCHEM



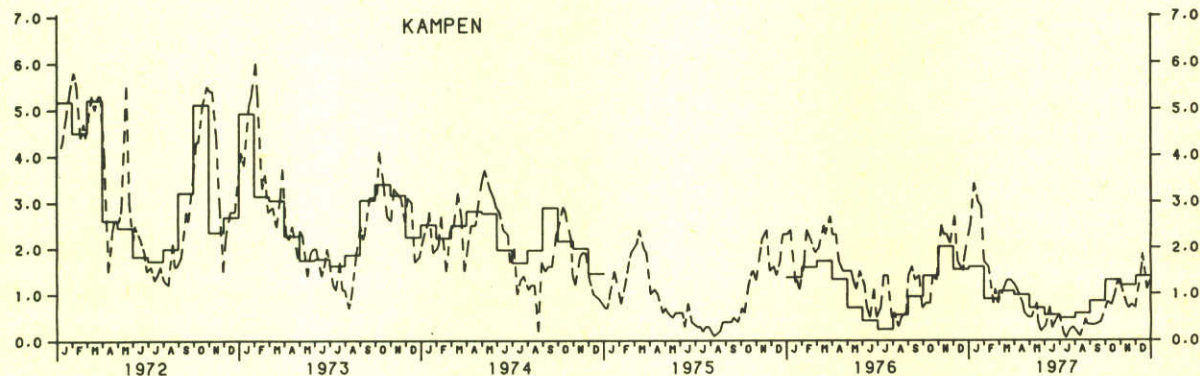
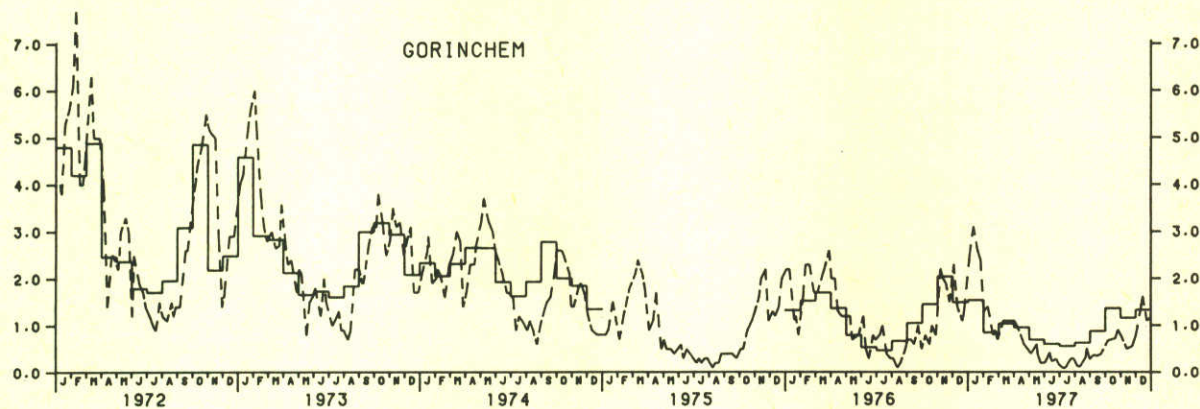
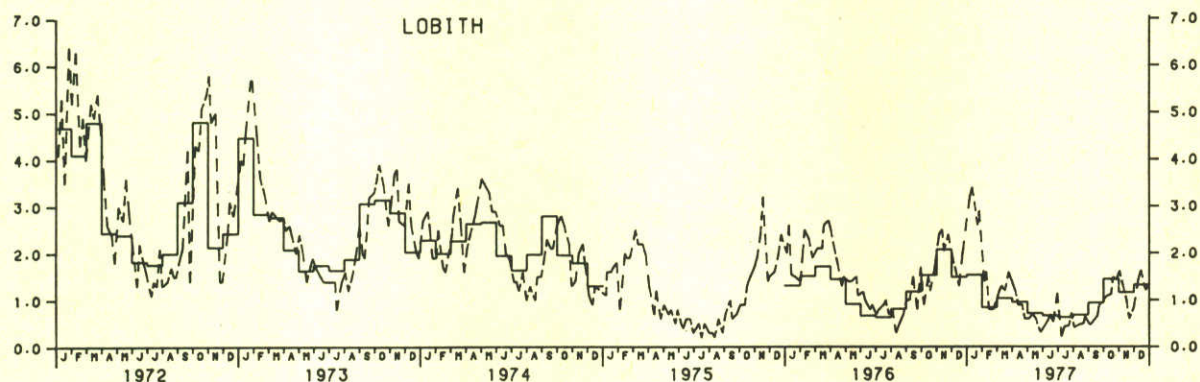
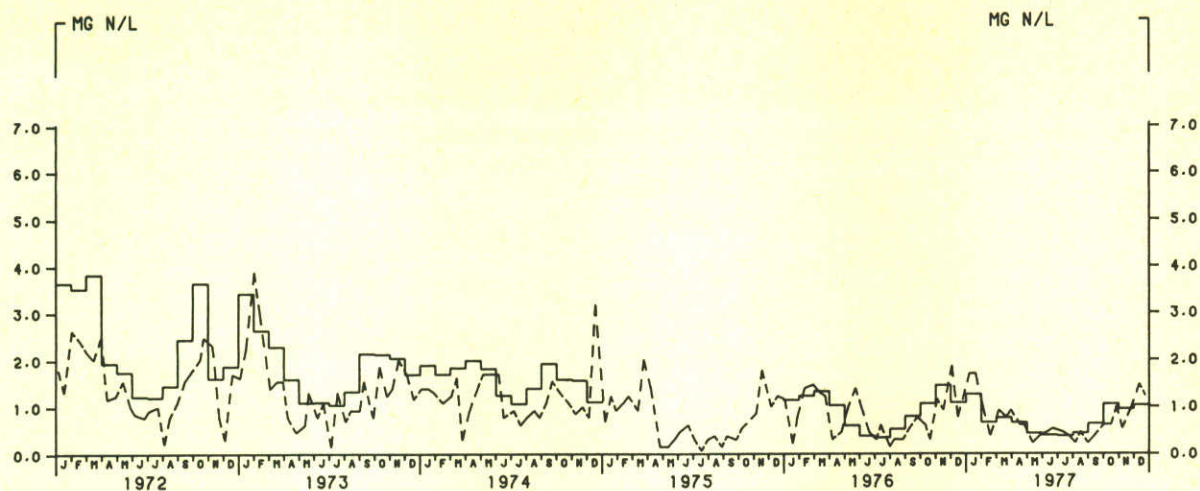
KAMPEN



maandgemiddelde simulatie 1972-1977  
 Lobith, Gorinchem, Kampen (Kjeldahl-stikstof)

A4

AMMONIUM-STIKSTOF BRAUBACH 1972 - 1977

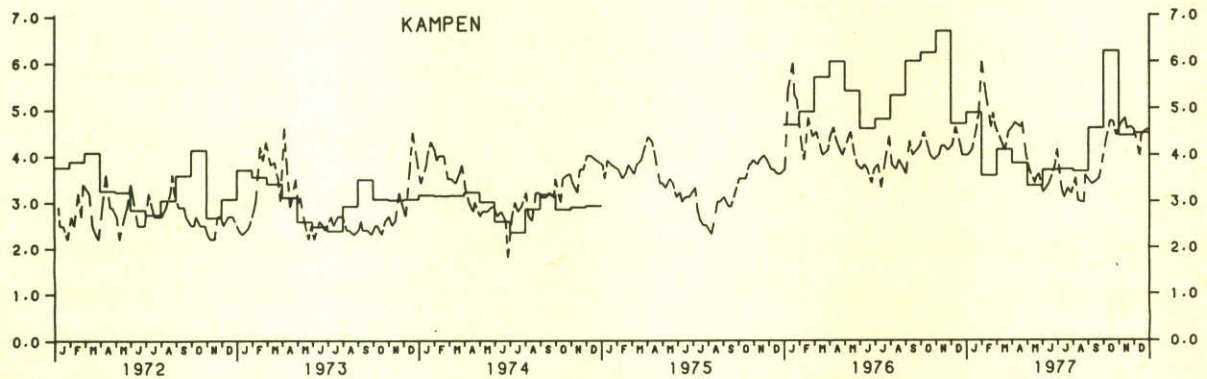
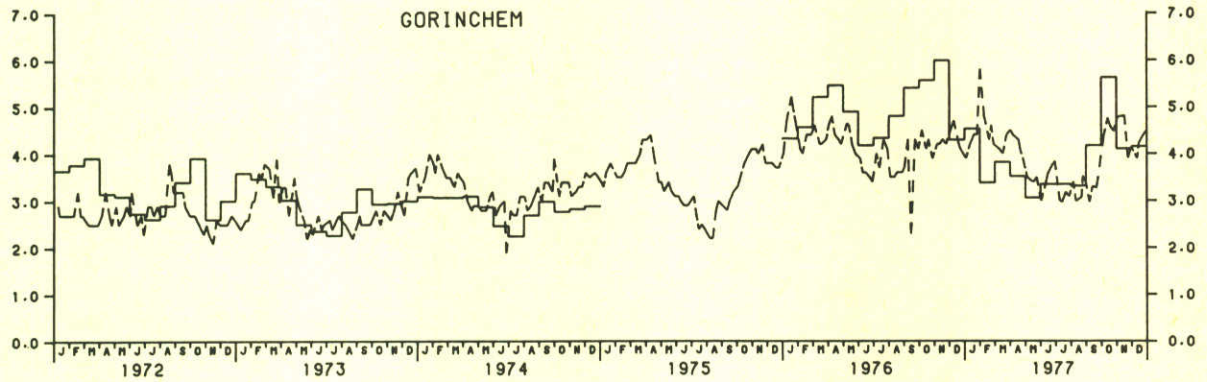
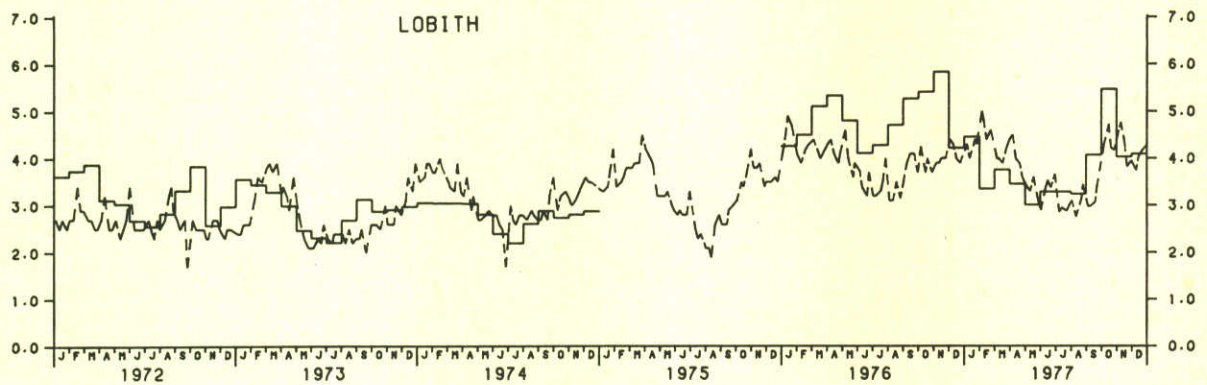
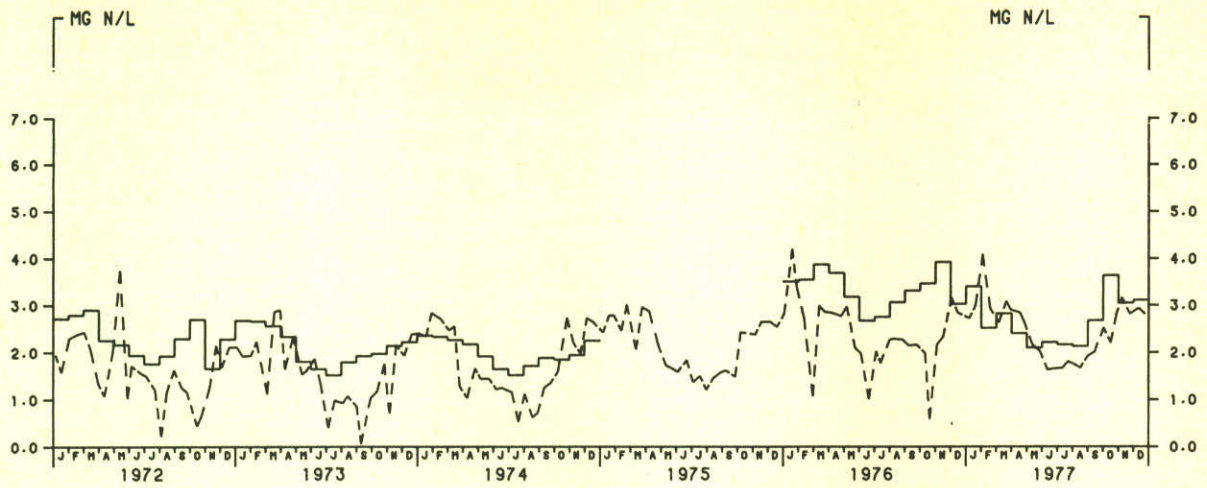


maandgemiddelde simulaties 1972-1977  
 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (ammonium)

A4

NITRAAT-STIKSTOF

BRAUBACH 1972 - 1977



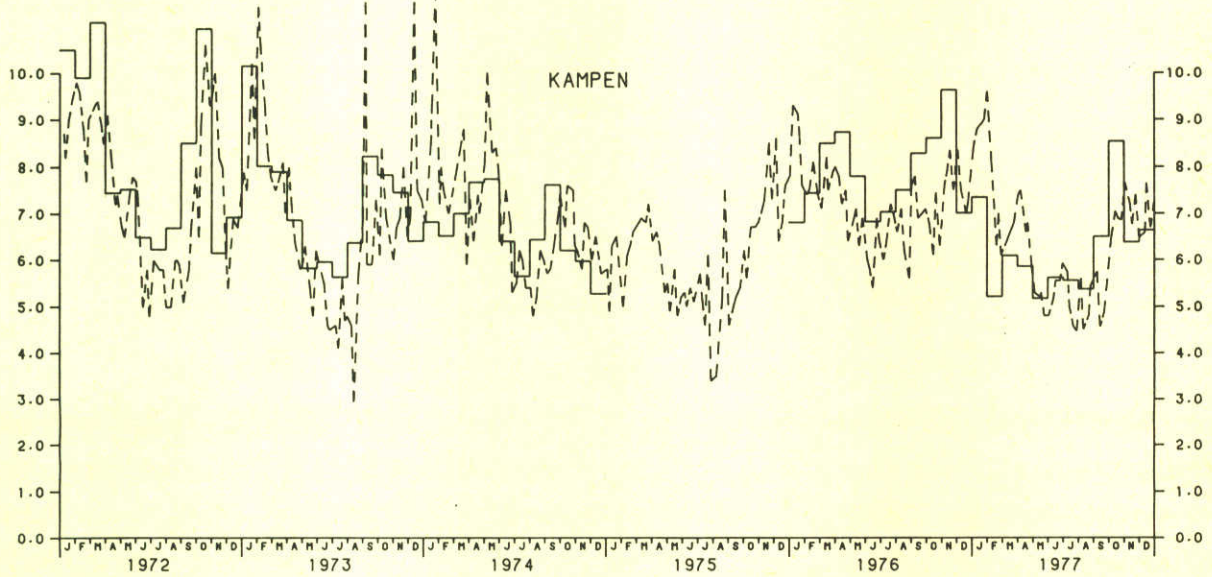
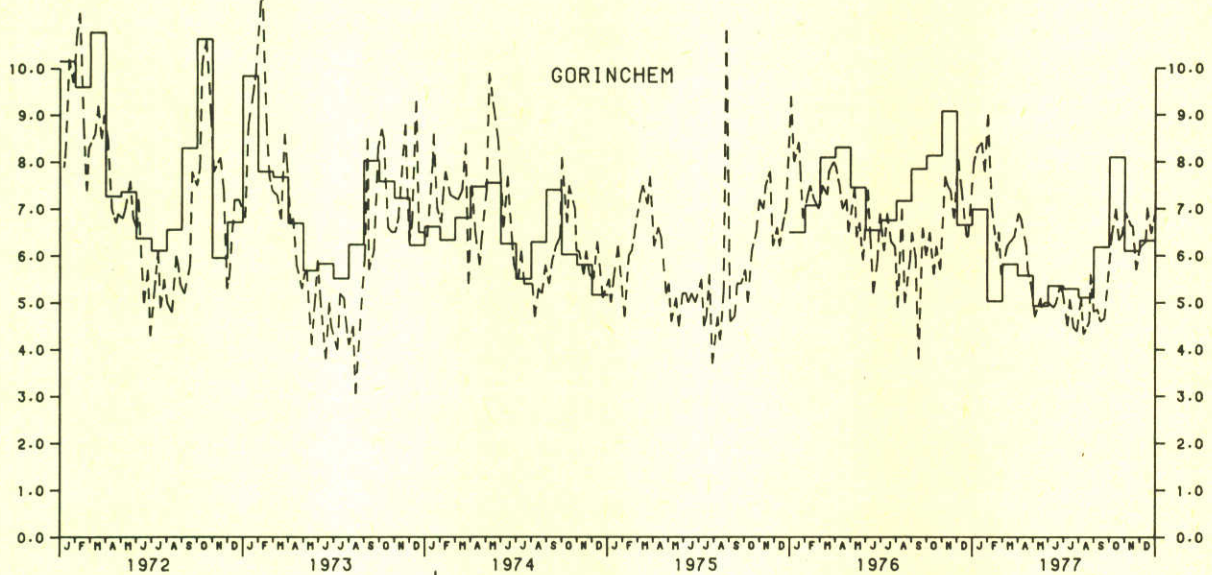
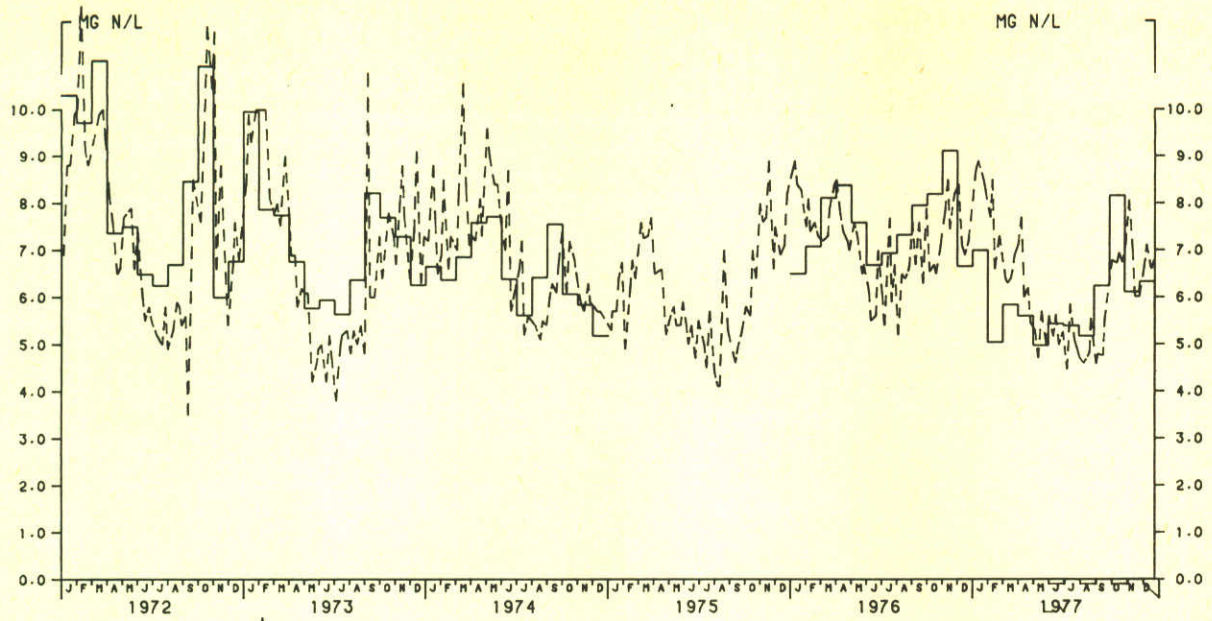
maandgemiddelde simulaties 1972-1977

Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (nitraat)

A4

TOTAAL-STIKSTOF

LOBITH 1972 - 1977

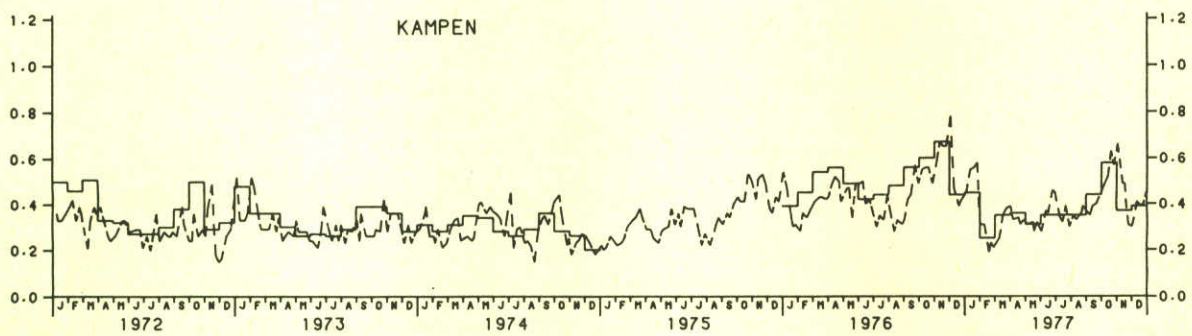
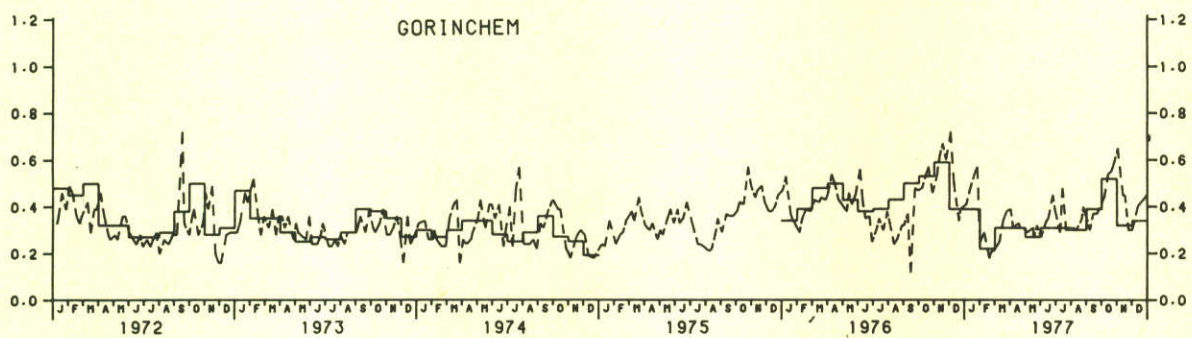
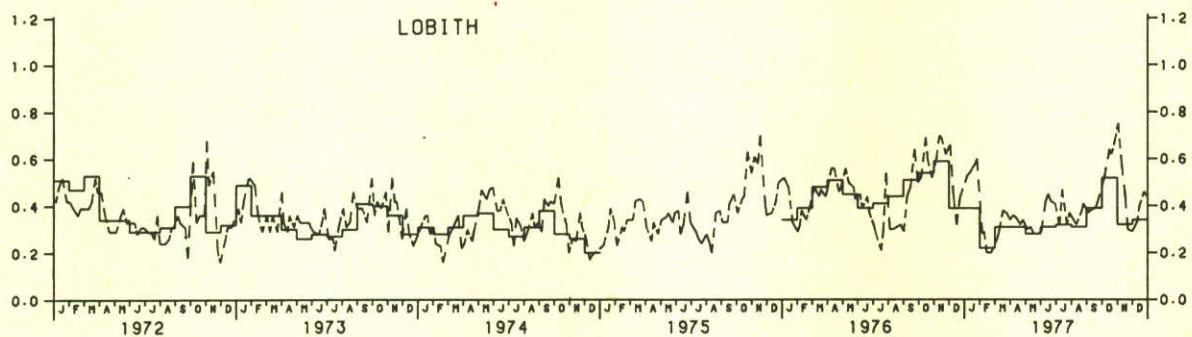
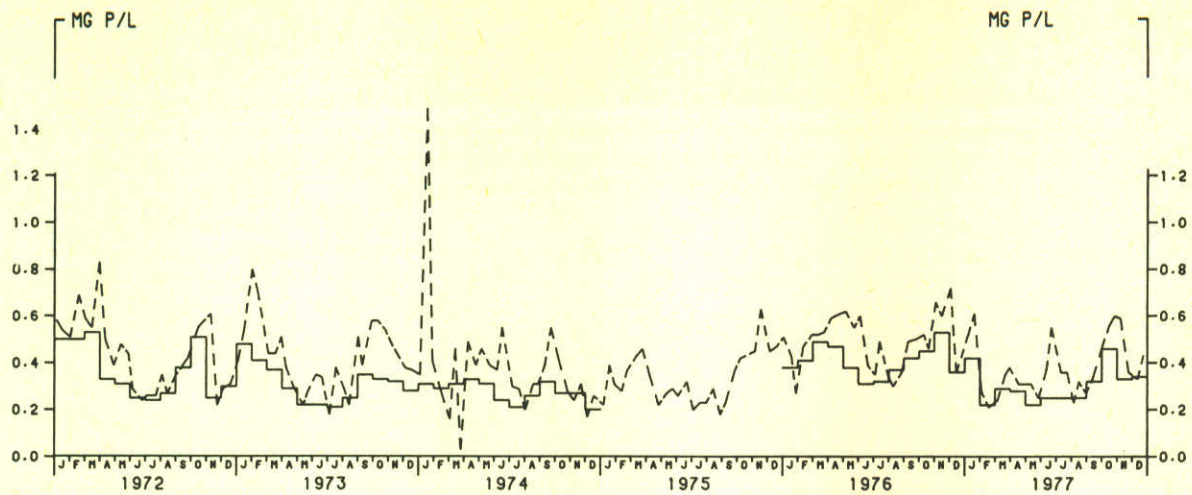


maandgemiddelde simulaties 1972-1977  
 Lobith, Gorinchem, Kampen (totaal-stikstof)

A4

ORTHO-FOSFAAT

BRAUBACH 1972 - 1977

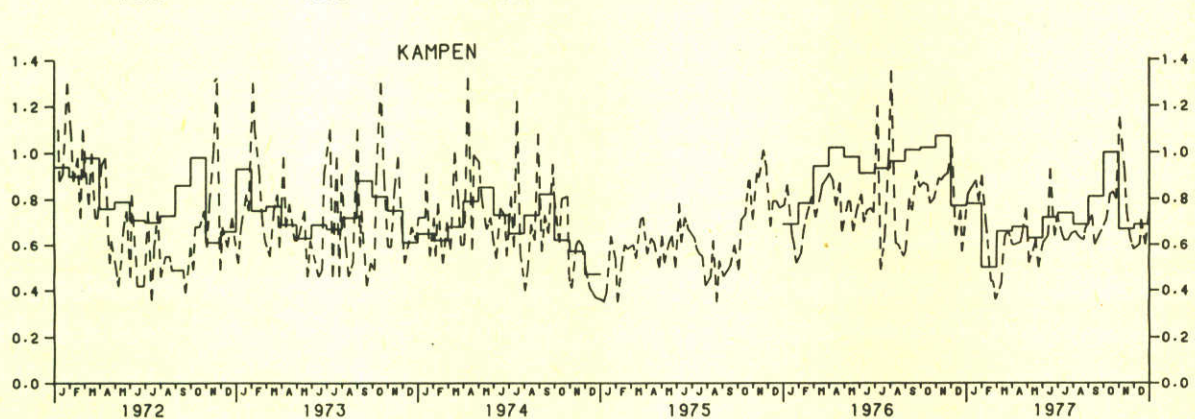
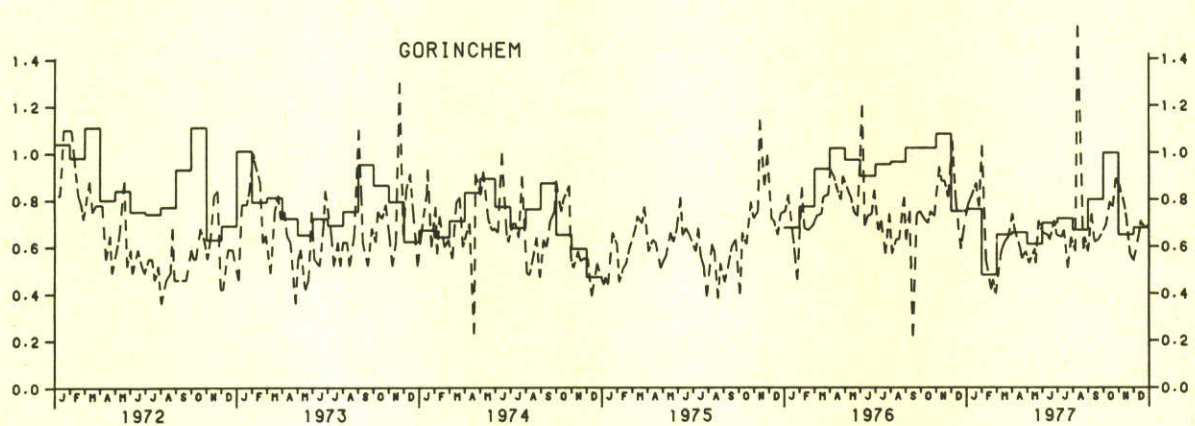
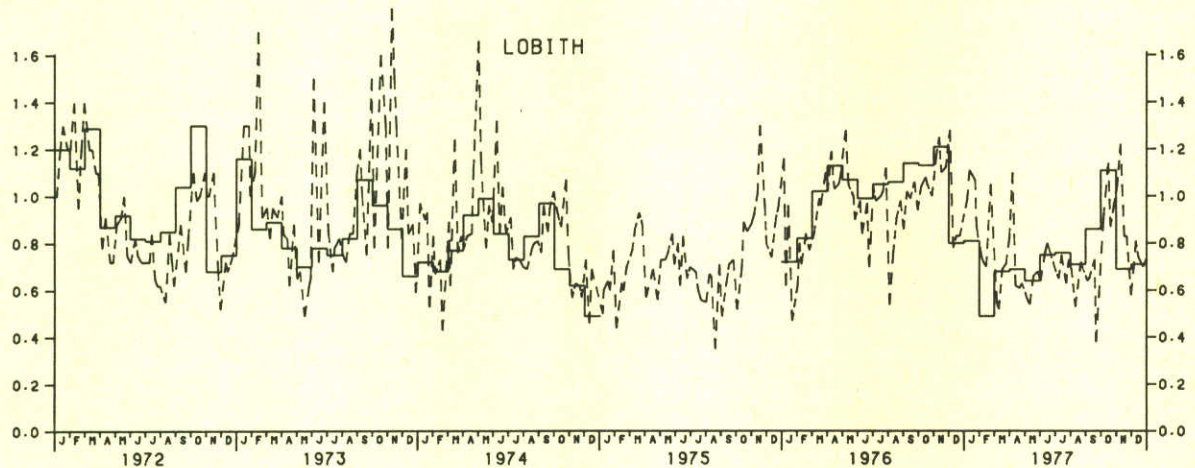
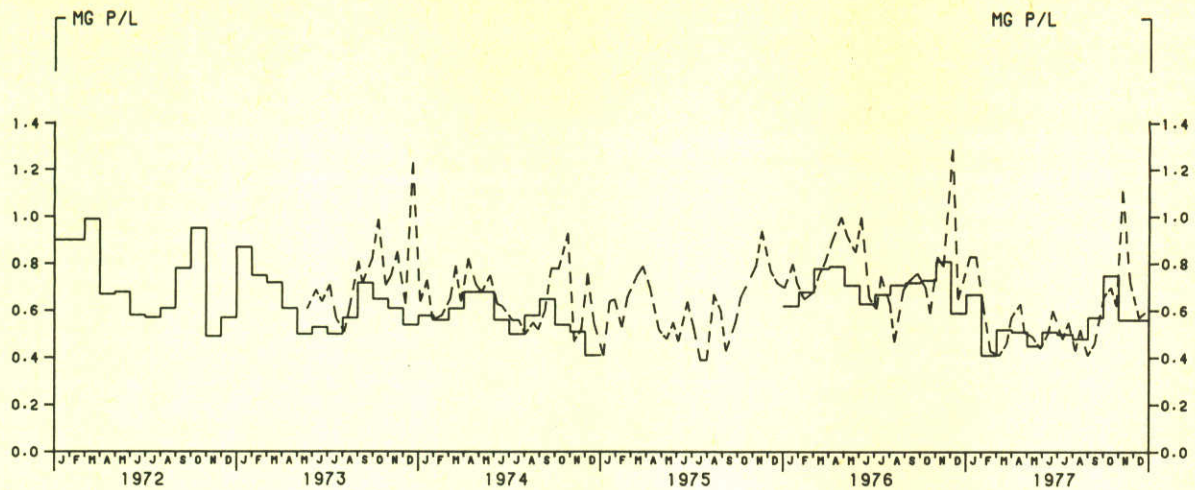


maandgemiddelde simulaties 1972-1977  
 Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (ortho-fosfaat)

A4

TOTAAL-FOSFAAT

BRAUBACH 1972 - 1977



maandgemiddelde simulaties 1972-1977

Braubach, Lobith, Gorinchem, Kampen (totaal-fosfaat)

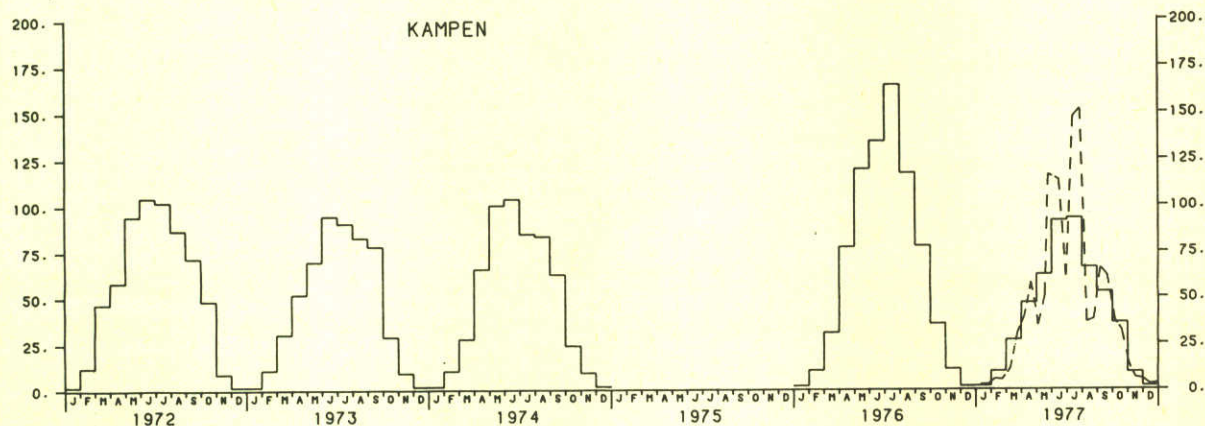
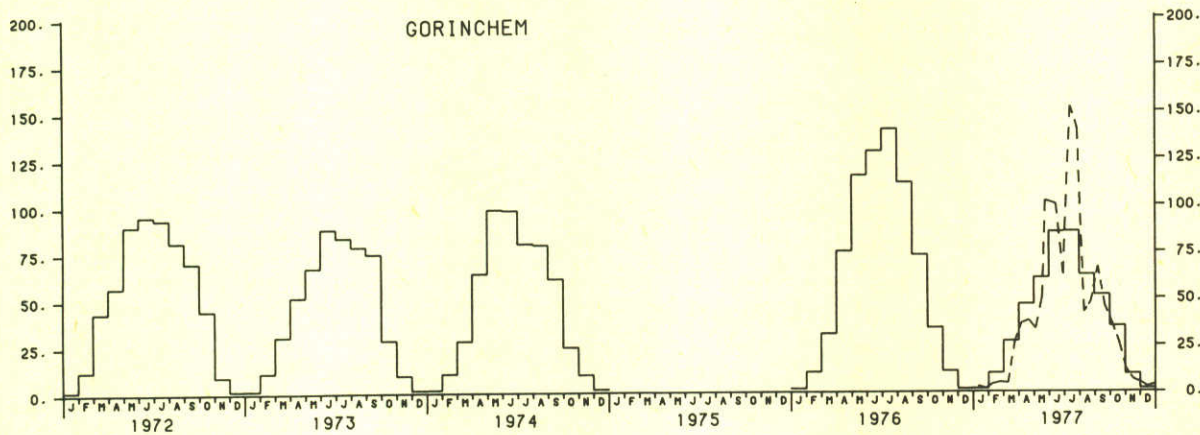
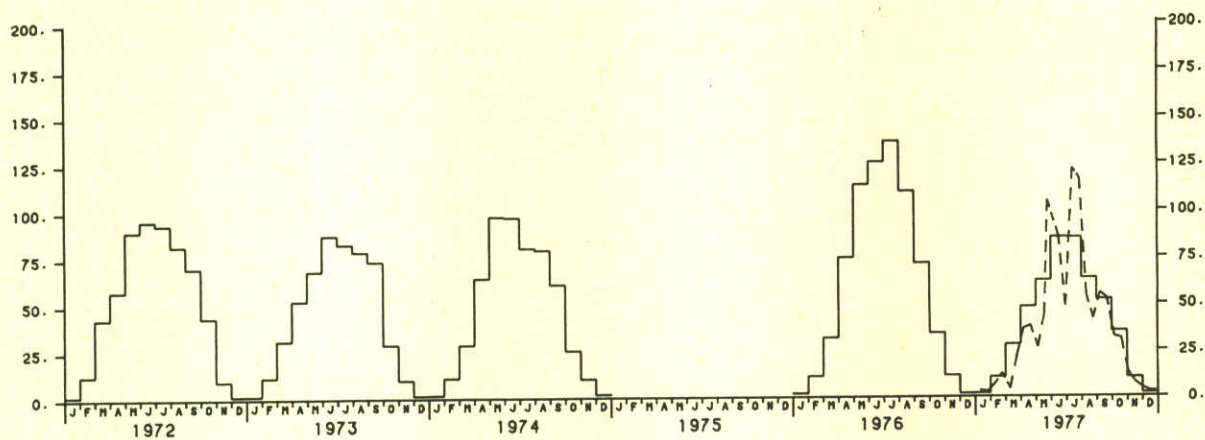
A4

ALGEN

LOBITH 1972 - 1977

UG CHL-A/L

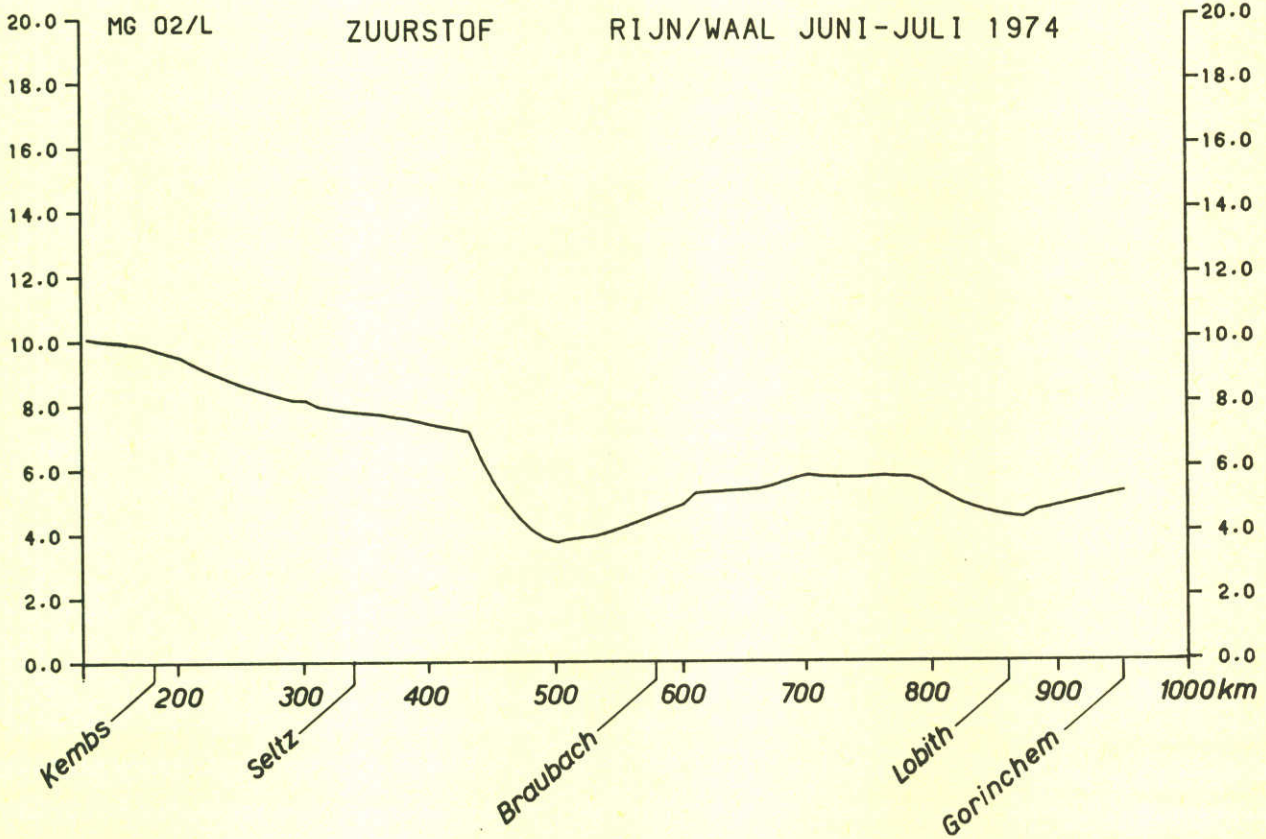
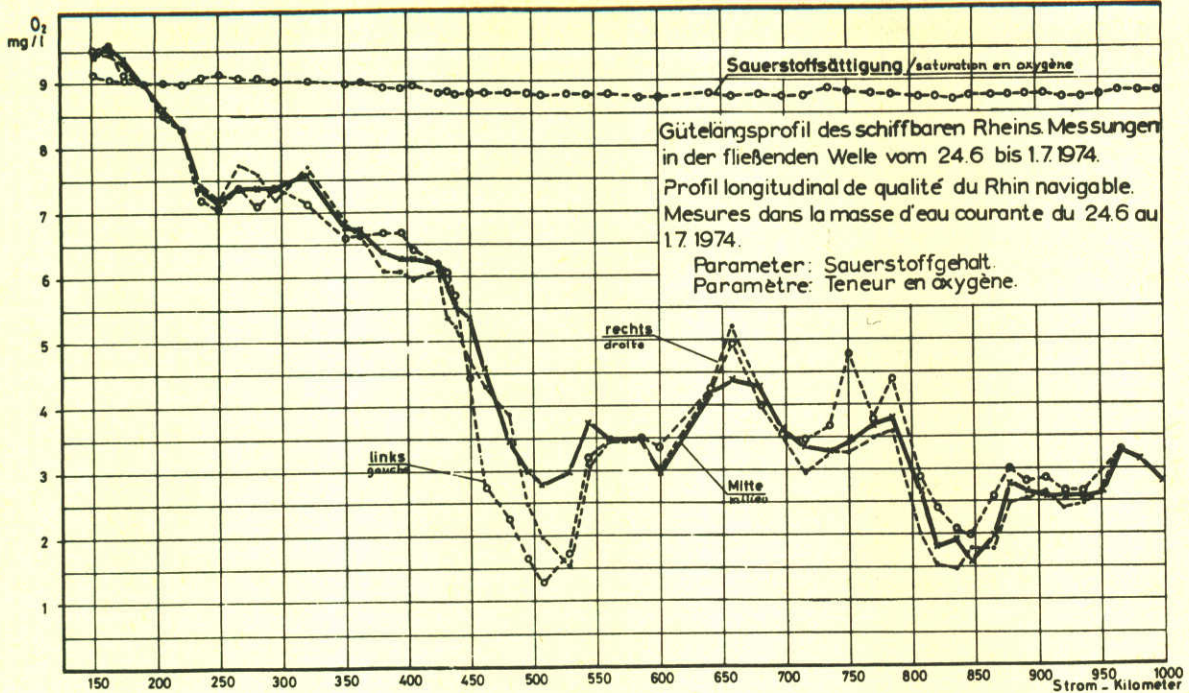
UG CHL-A/L



maandgemiddelde simulaties 1972-1977

Lobith, Gorinchem, Kampen (algen)

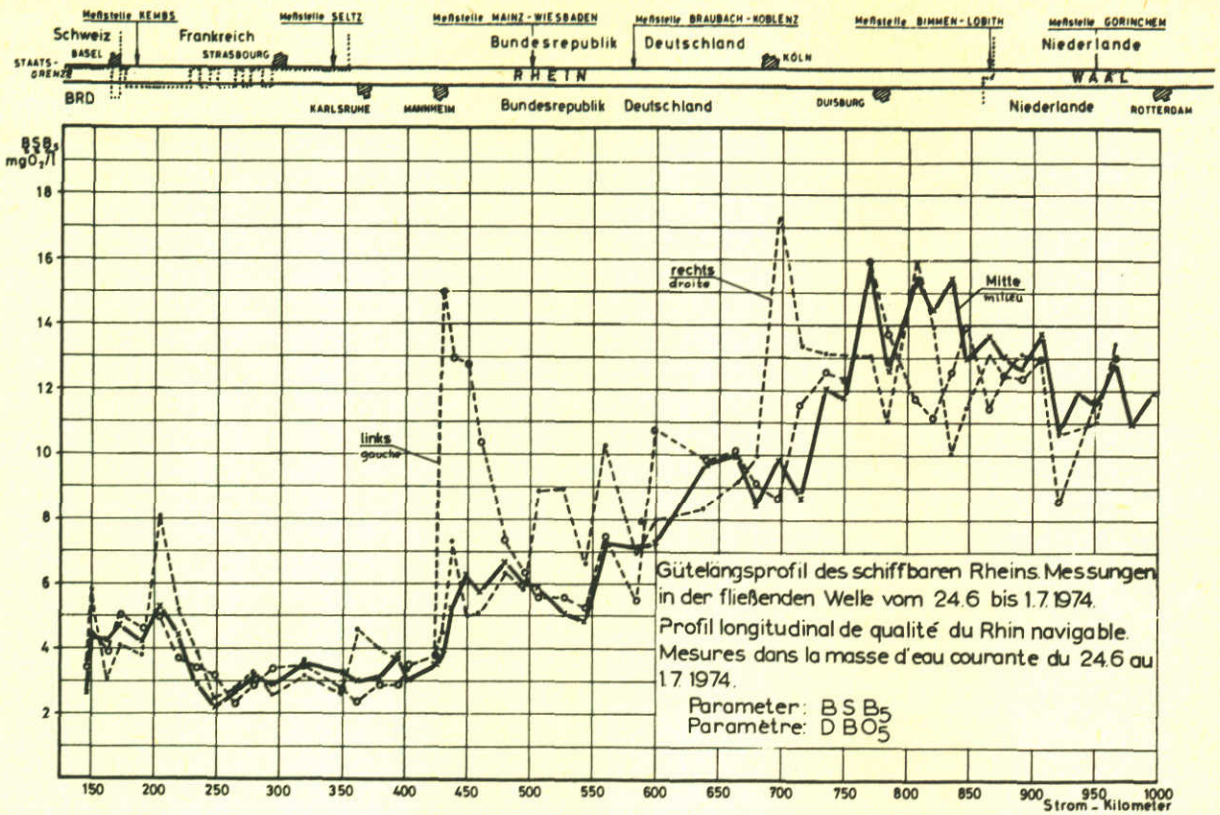
A4



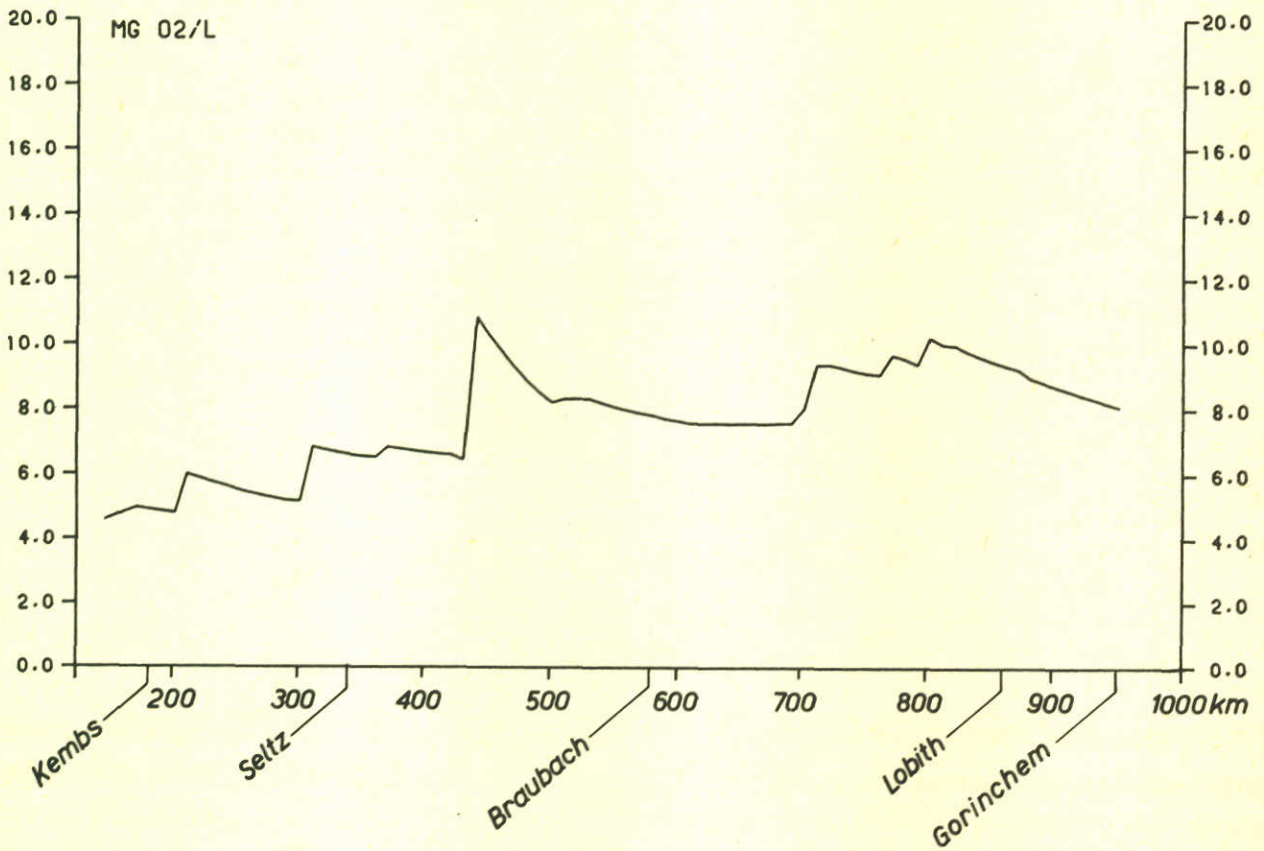
simulaties "fliessende Welle" 1974 (zuurstof)

A4



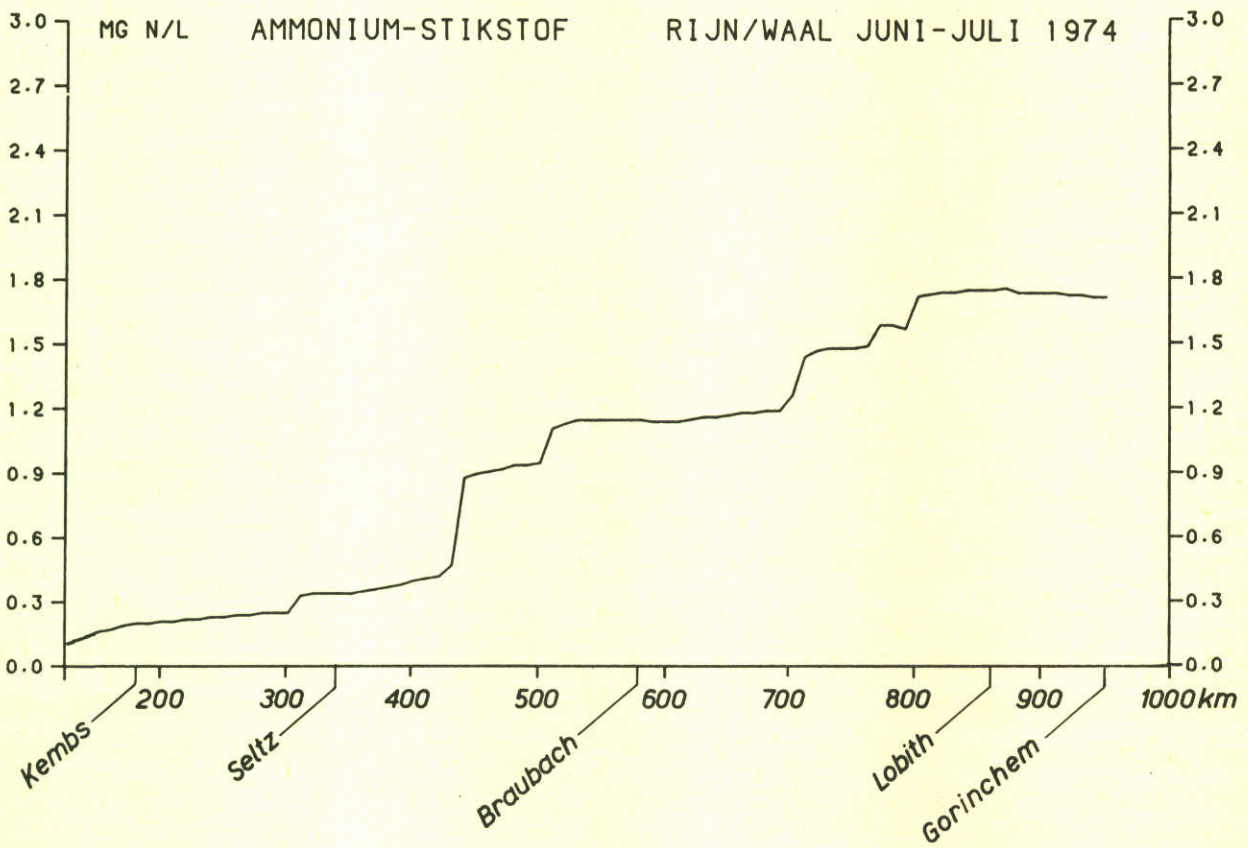
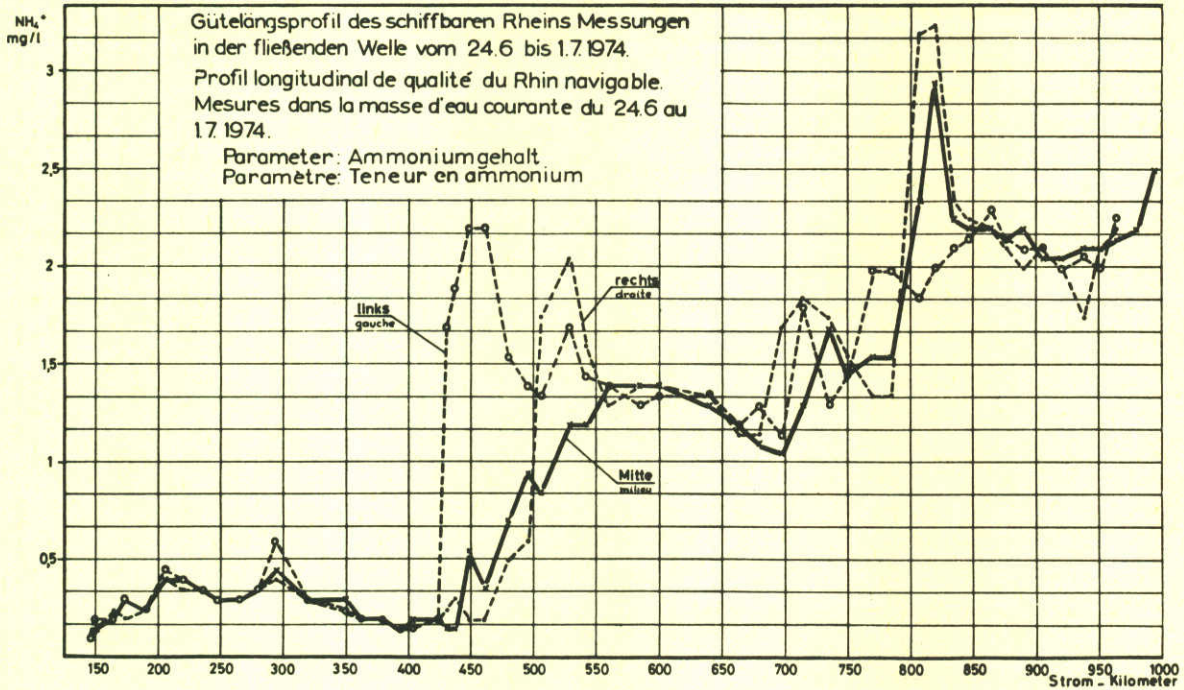
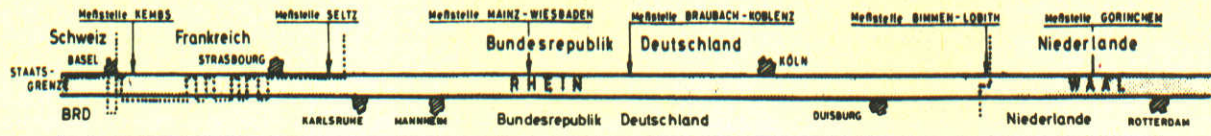


BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/WAAL JUNI-JULI 1974



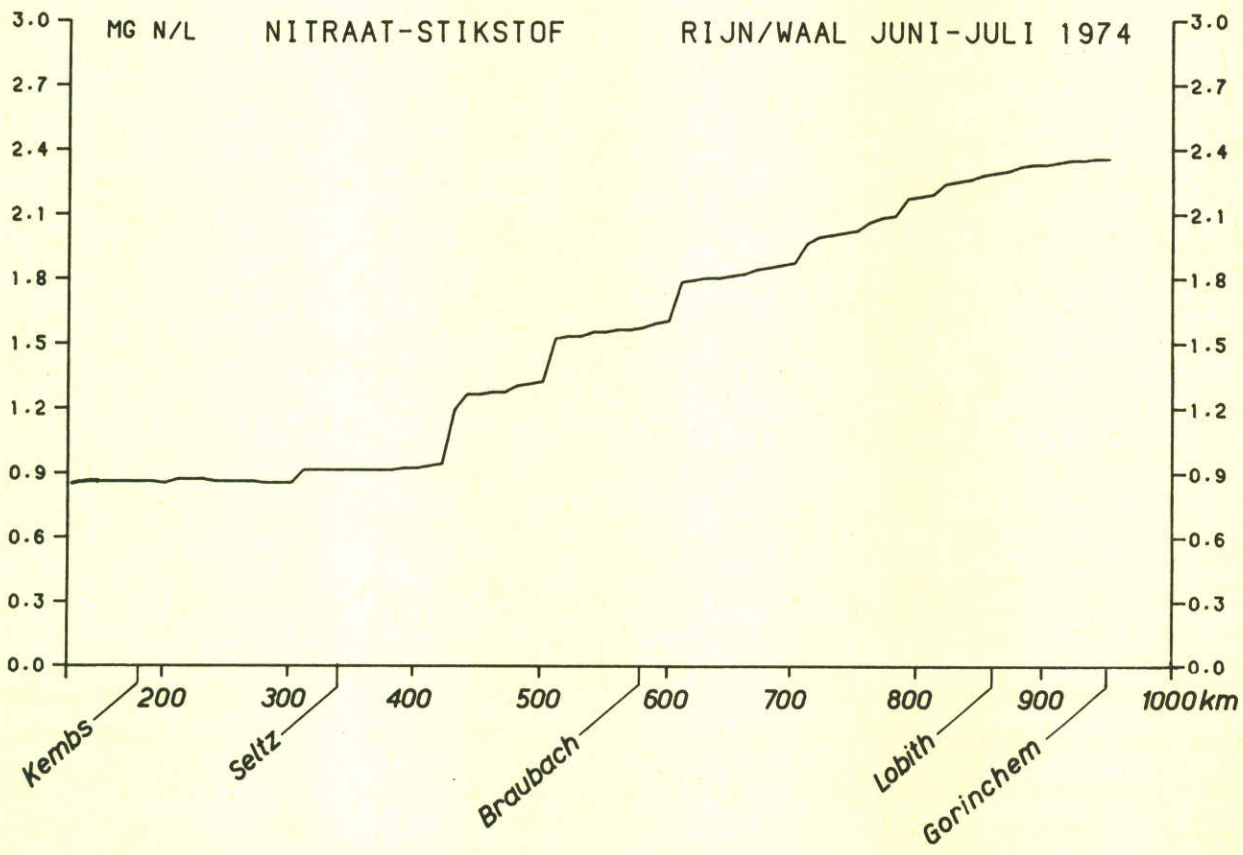
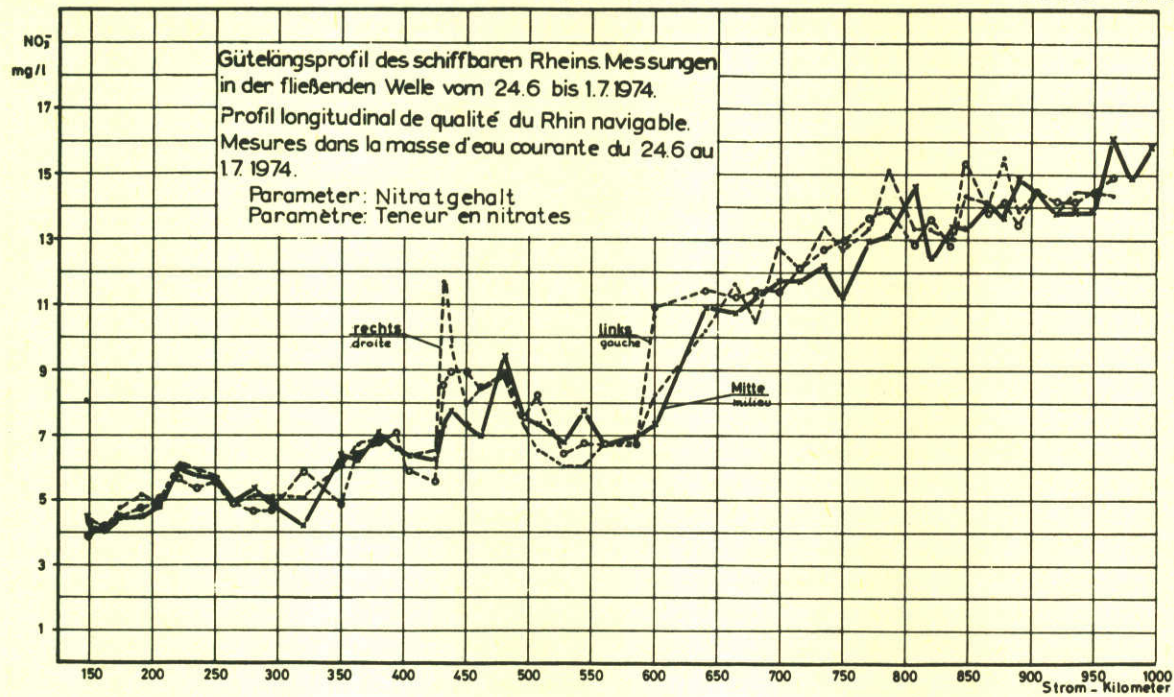
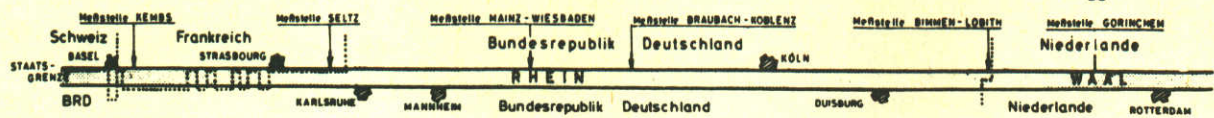
simulatie "fliessende Welle", 1974 (BOD<sub>5</sub><sup>20</sup>)

A4



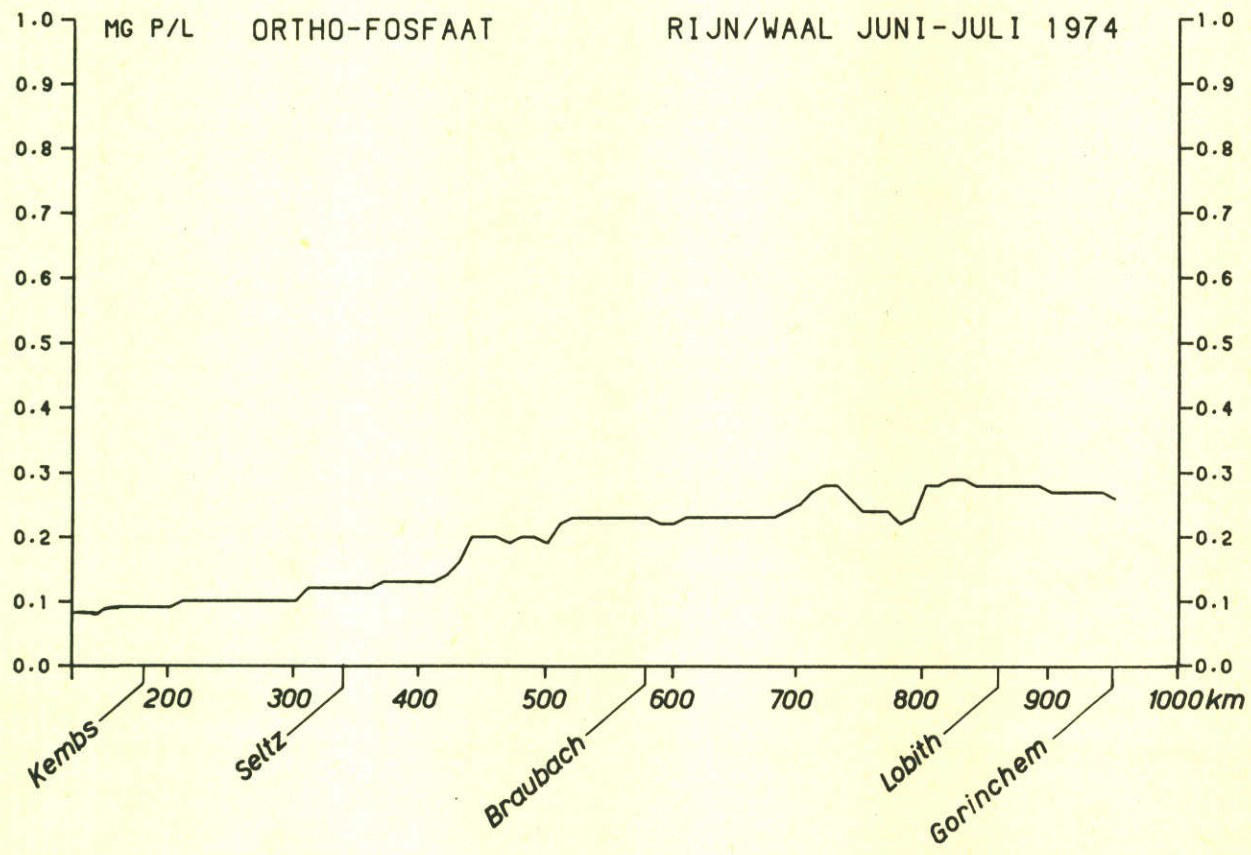
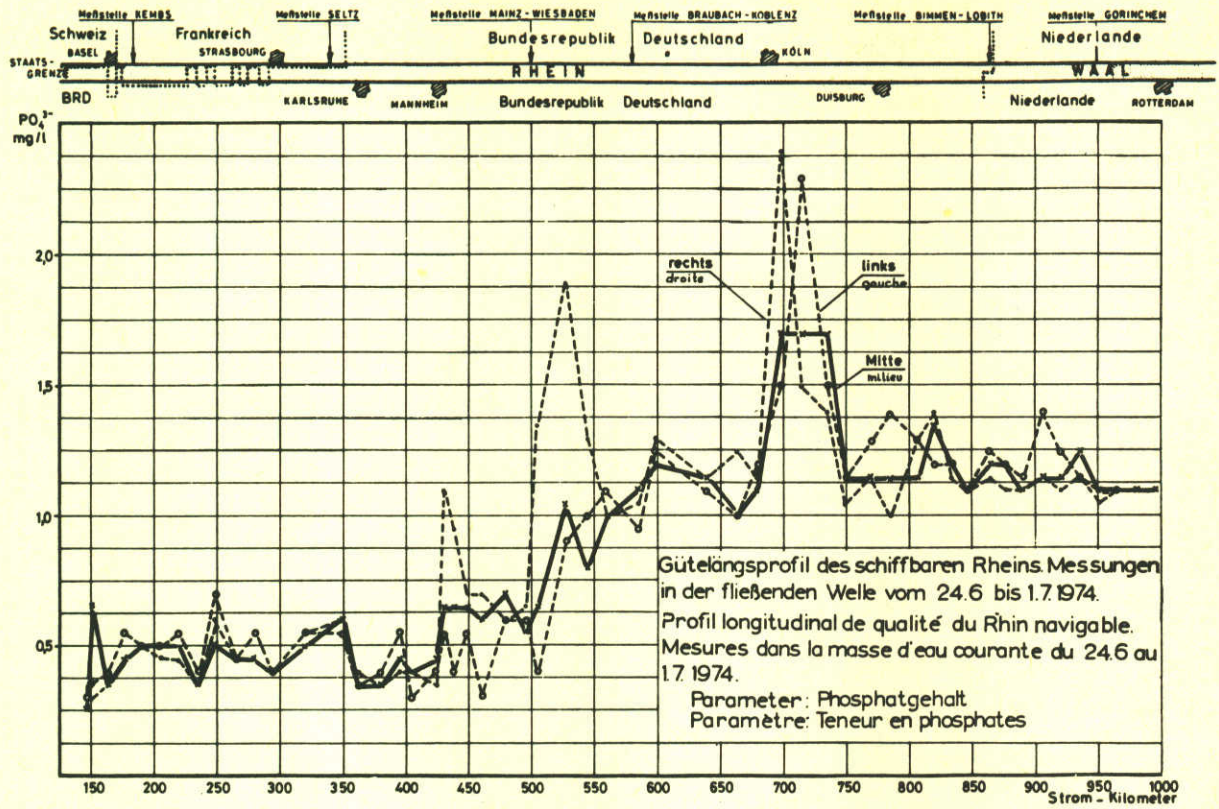
simulatie "fliessende Welle", 1974 (ammonium)

A4



simulatie "fliessende Welle", 1974 (nitraat)

A4

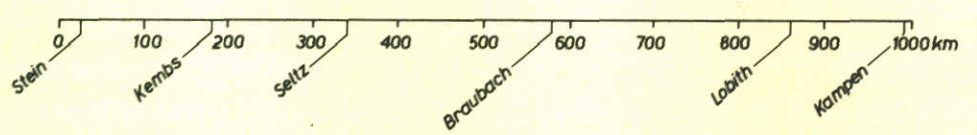
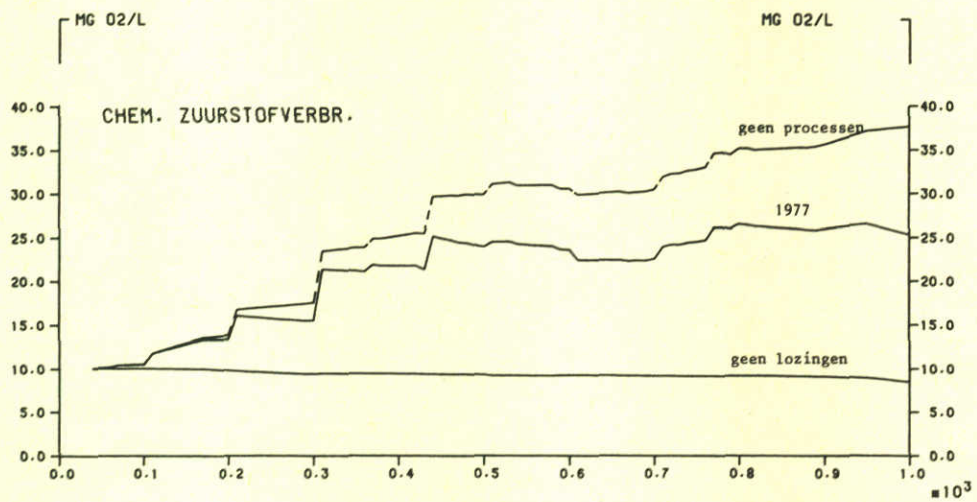
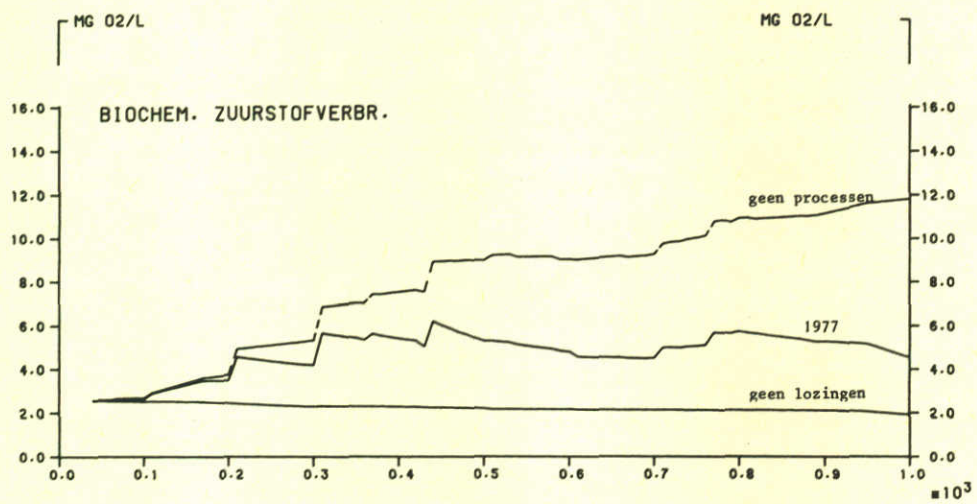
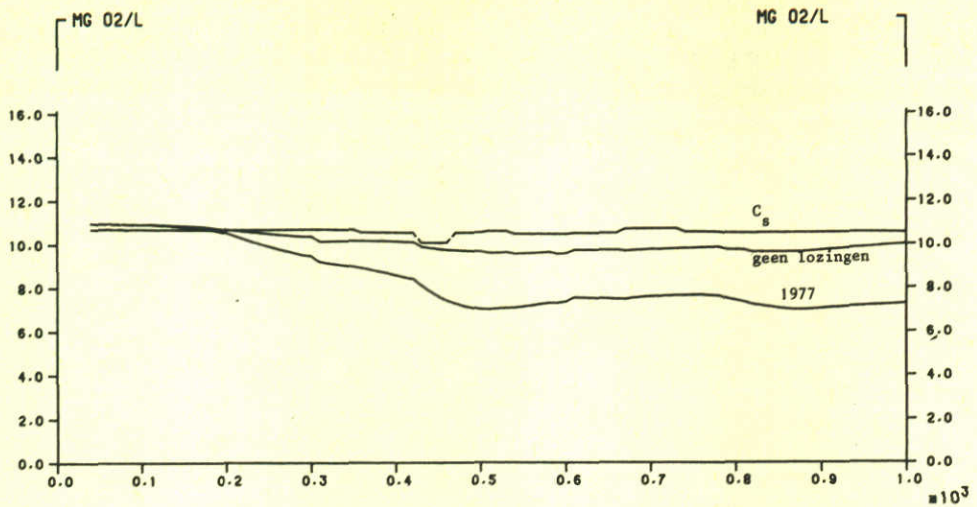


simulatie "fliessende Welle", 1974 (ortho-fosfaat)

A4

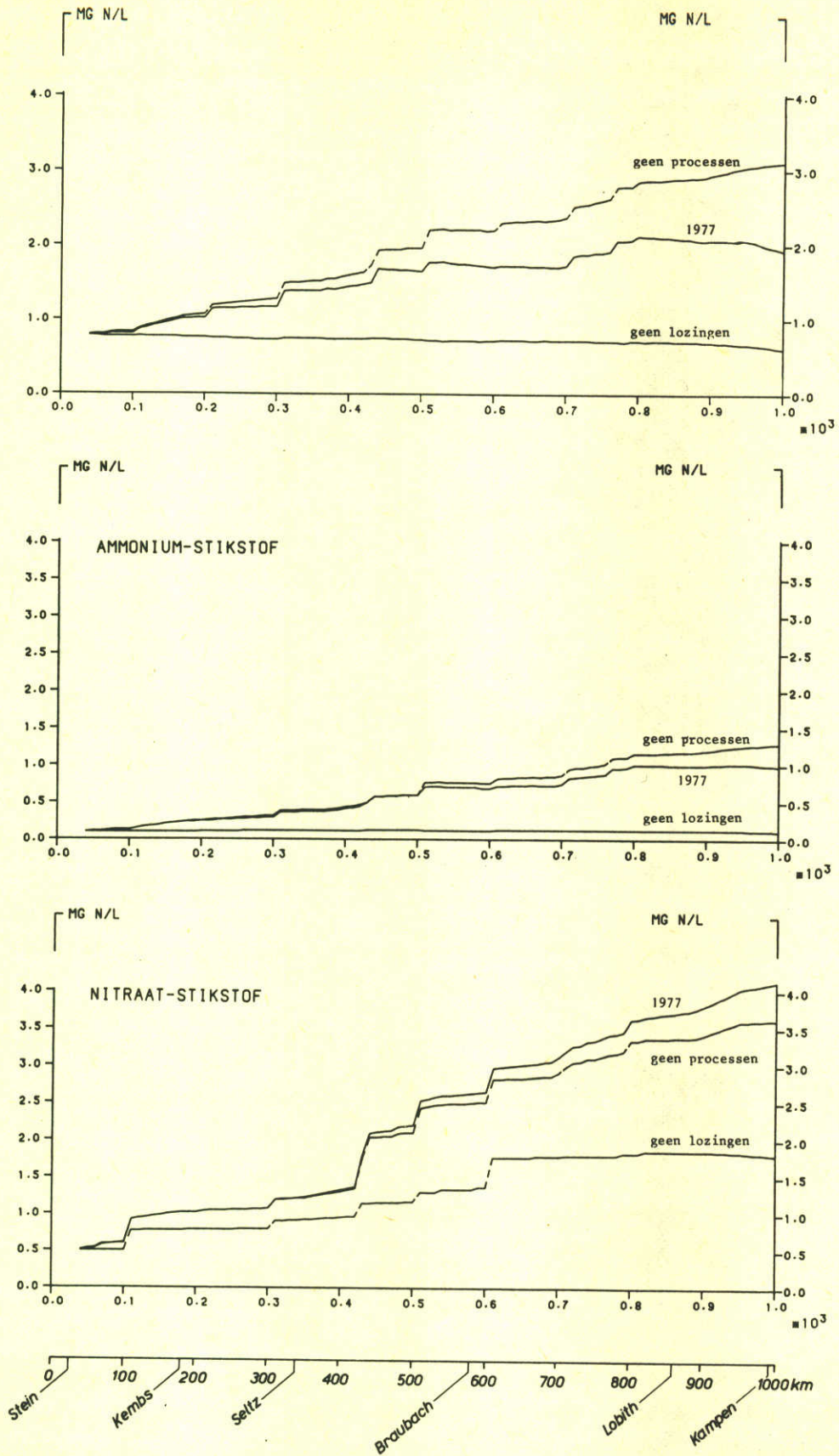
ZUURSTOF

RIJN/IJSSEL 1977



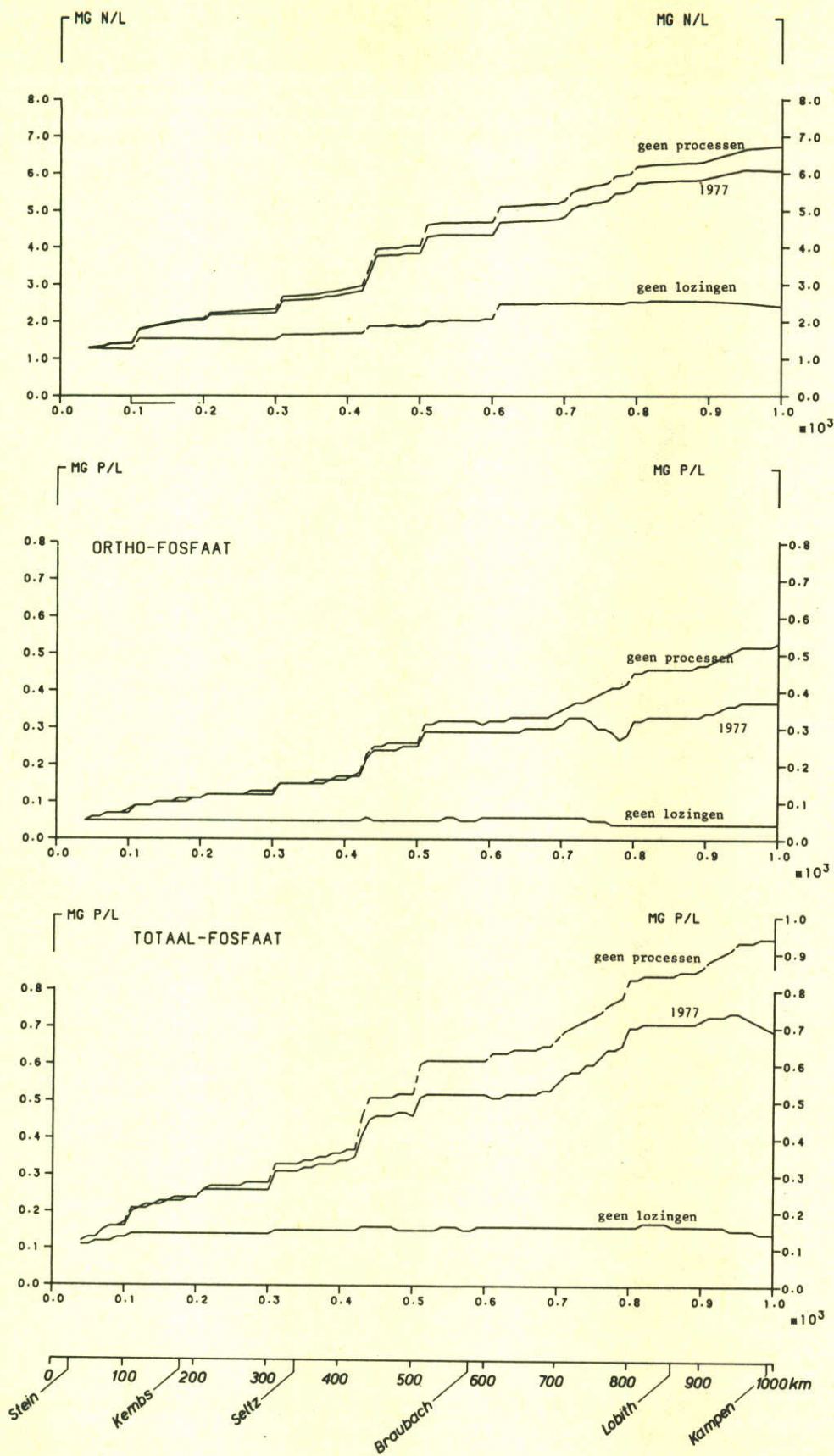
Invloed van afvalwater lozingen en processen op  
zuurstof, BOD, COD (jaargemiddelde 1977)

KJELDAHL-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



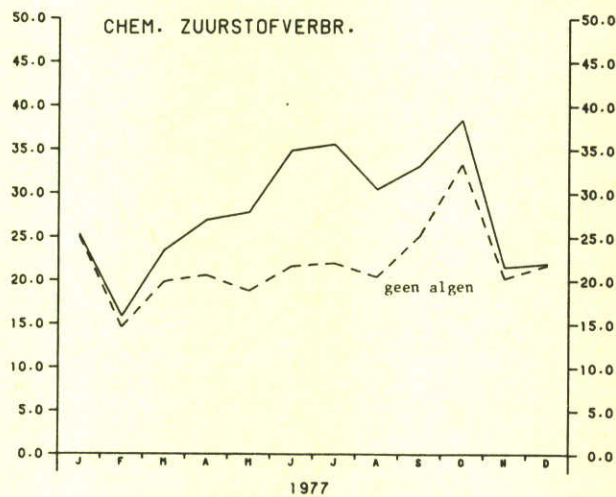
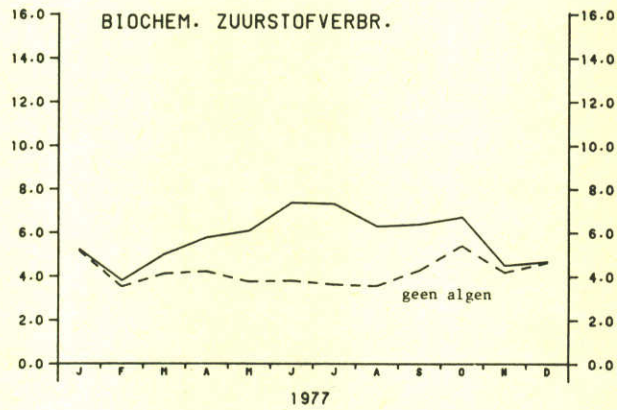
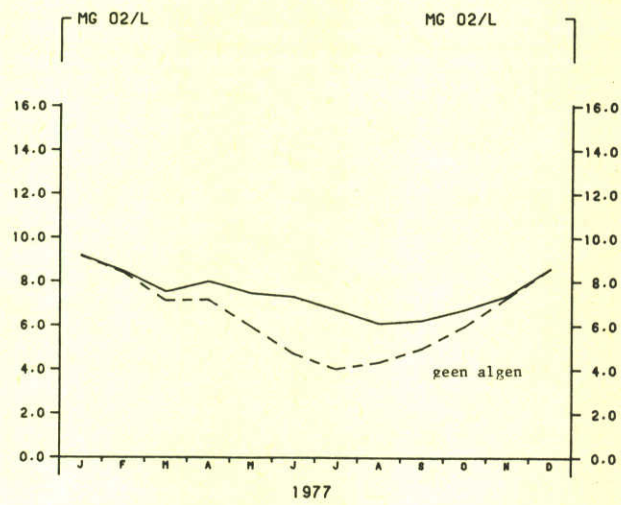
Invloed van afvalwater lozingen en processen  
op Kj-d-N, ammonium en nitraat (jaargemiddelde 1977)

TOTAAL-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



Invloed van afvalwater lozingen en processen op  
 totaal-N, ortho-P, totaal-P (jaargemiddelde 1977)

ZUURSTOF LOBITH 1977

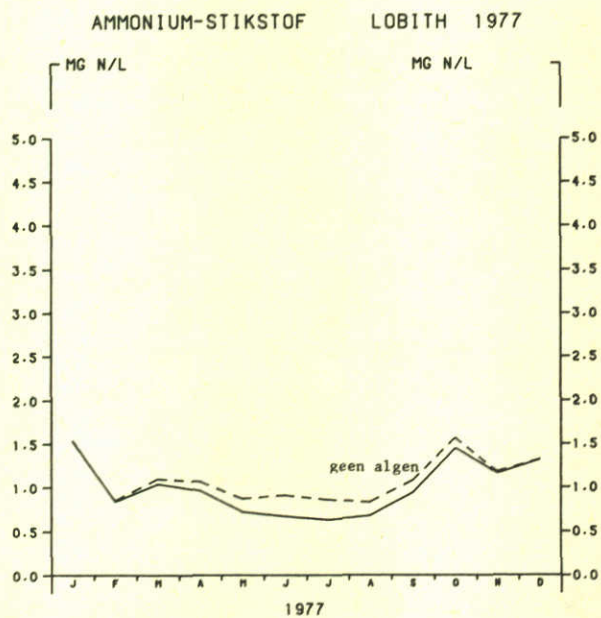
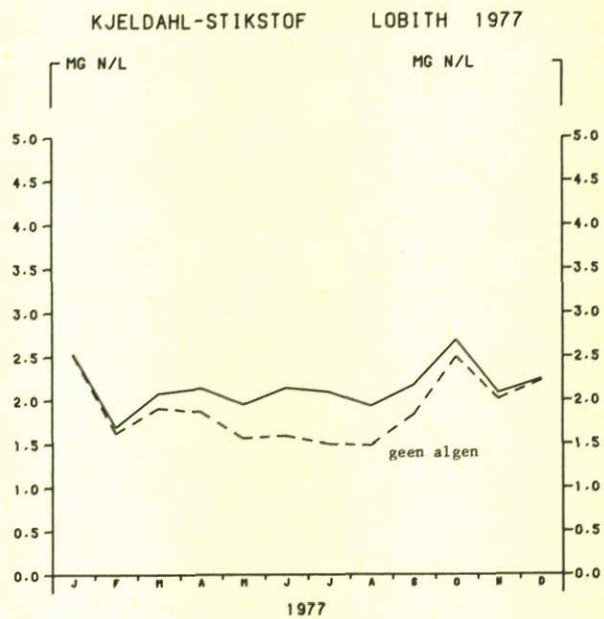


Invloed van algen op zuurstof, BOD, COD

(Lobith, maandgemiddelde 1977)

A4





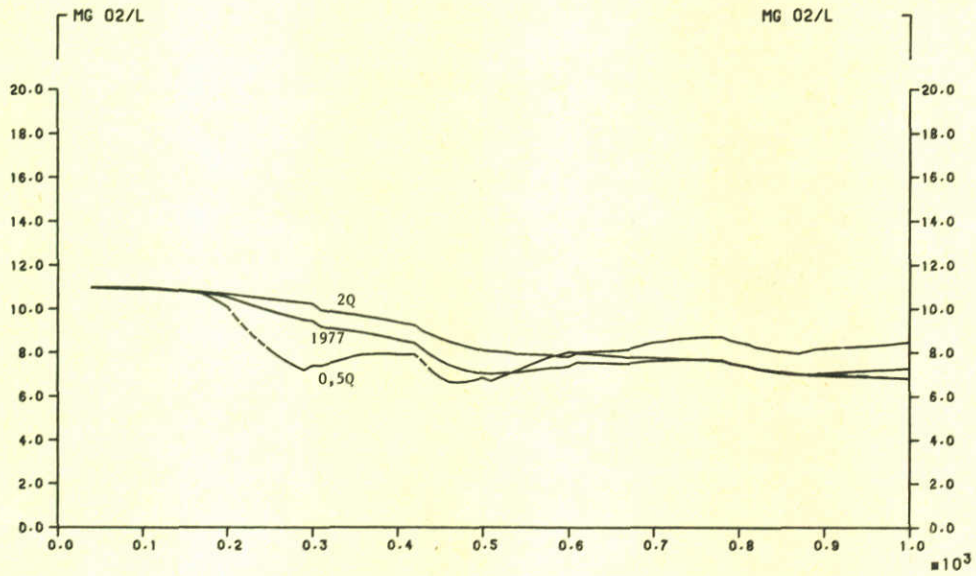
Invloed van algen op Kjd-stikstof, ammonium

(Lobith, maandgemiddelde 1977)

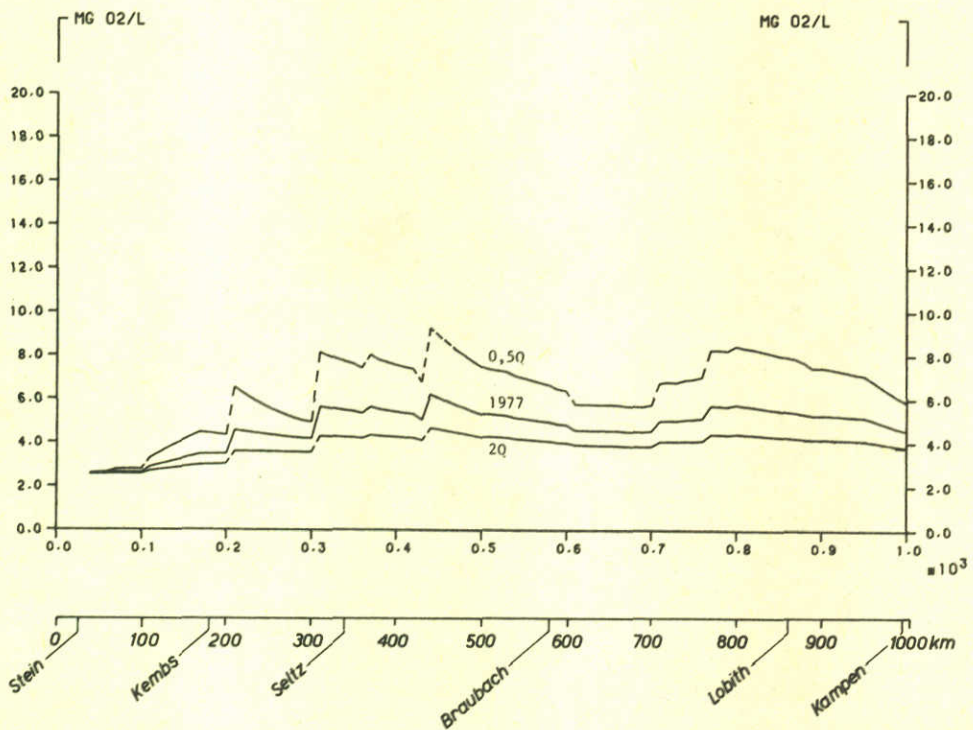
A4

ZUURSTOF

RIJN/IJSSEL 1977

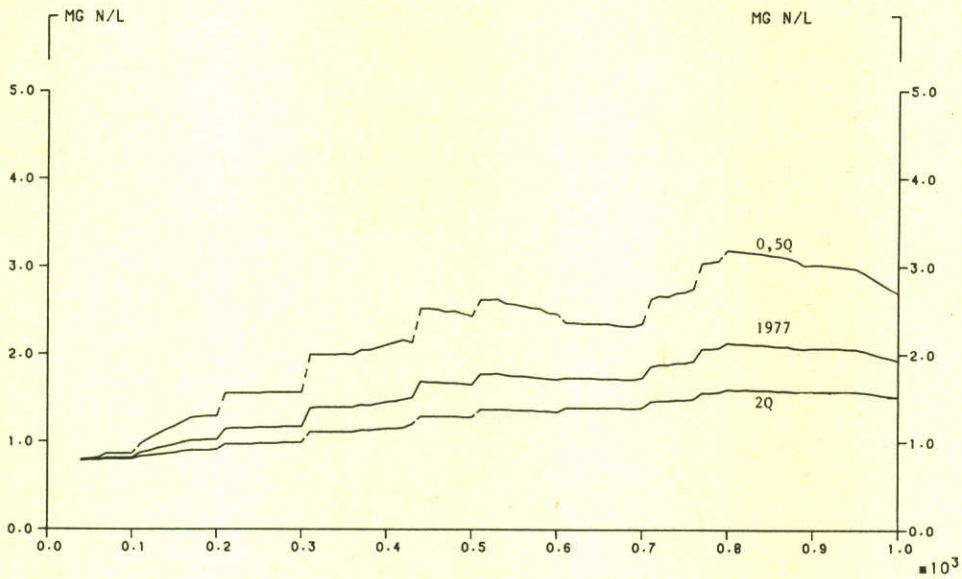


BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/IJSSEL 1977

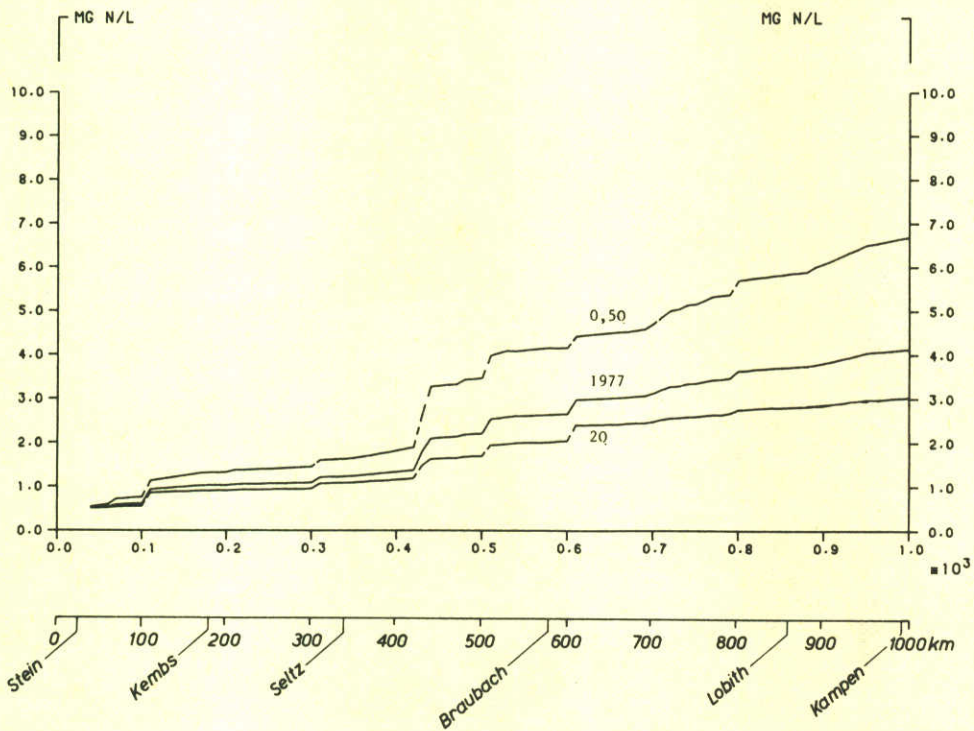


Invloed van het afvoerregiem op zuurstof en BOD  
(jaargemiddelde 1977)

KJELDAHL-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



NITRAAT-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977

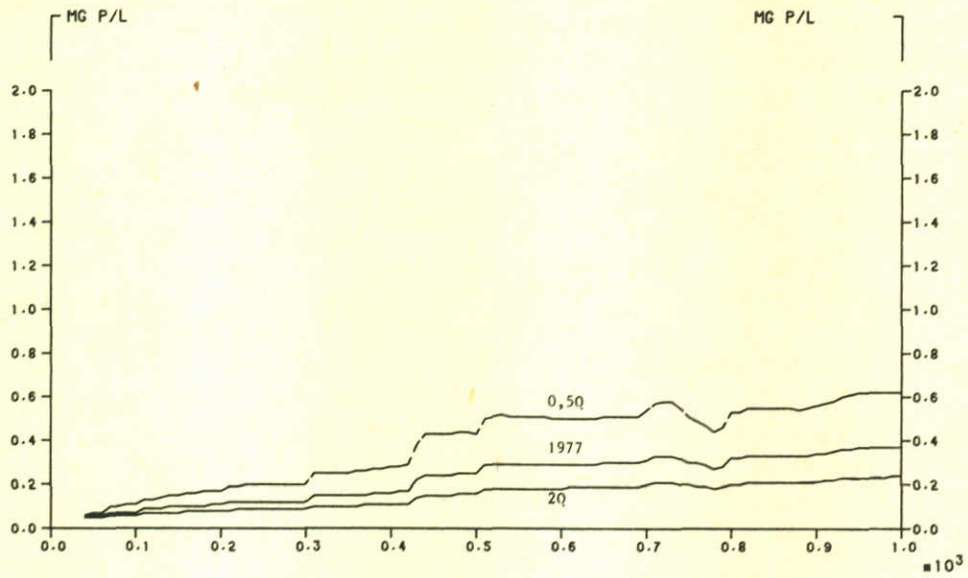


Invloed van het afvoerregiem op Kjd-N en nitraat  
(jaargemiddelde 1977)

A4

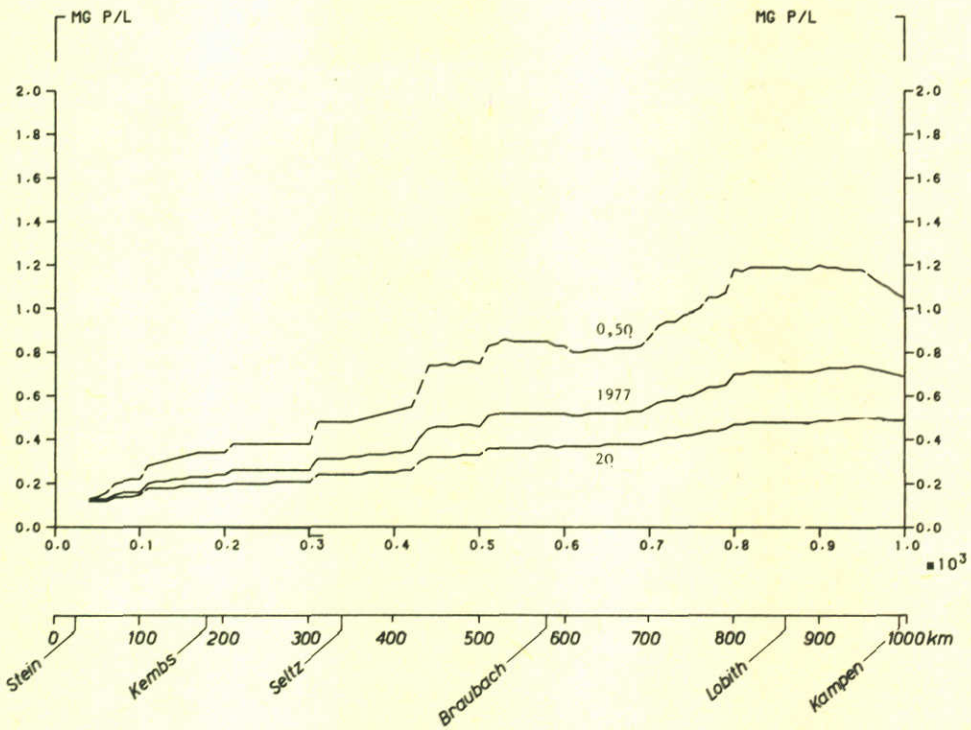
ORTHO-FOSFAAT

RIJN/IJSSEL 1977



TOTAAL-FOSFAAT

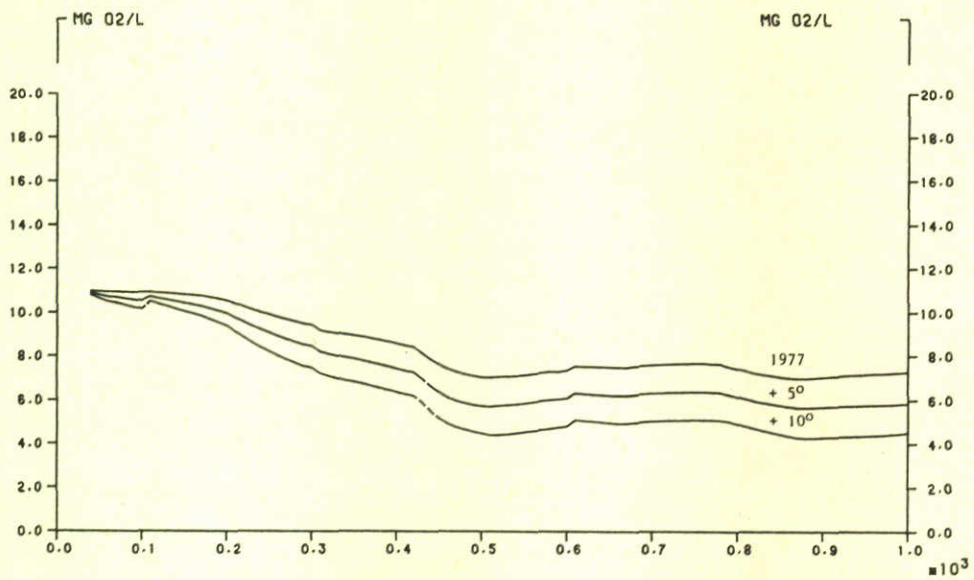
RIJN/IJSSEL 1977



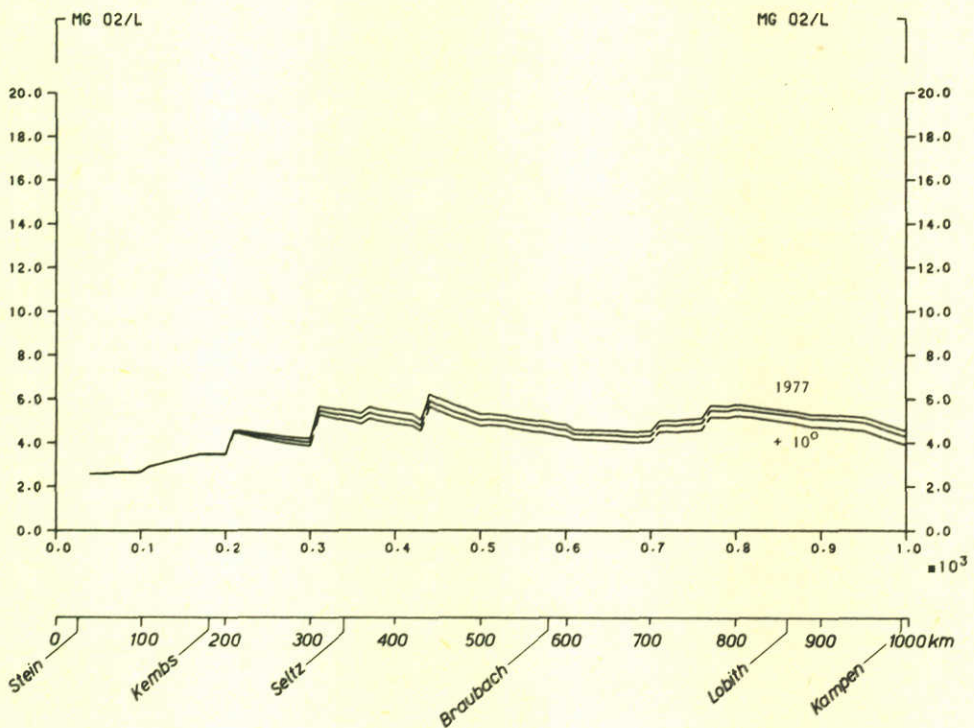
Invloed van het afvoerregiem op ortho-P en totaal-P  
(jaargemiddelde 1977)

ZUURSTOF

RIJN/IJSSEL 1977

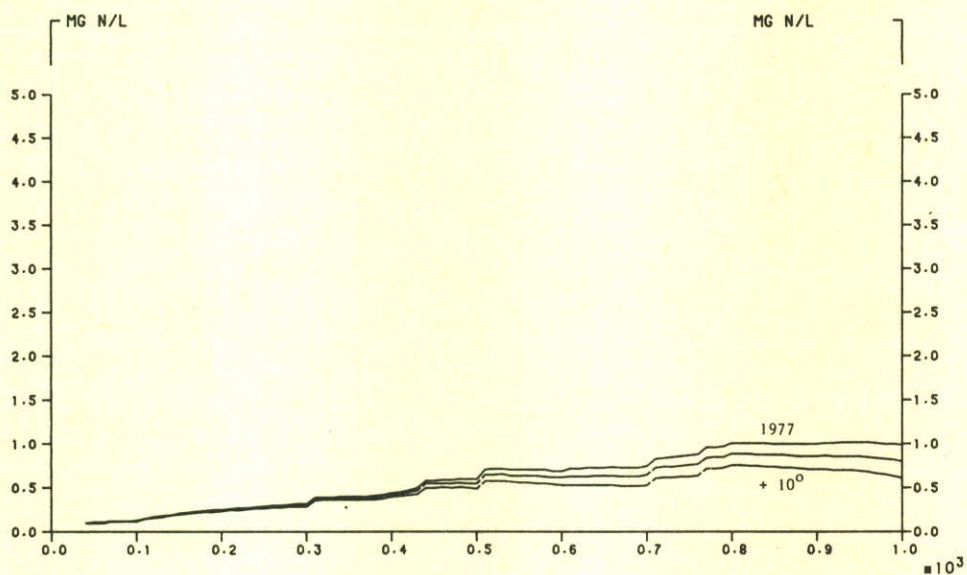


BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. RIJN/IJSSEL 1977

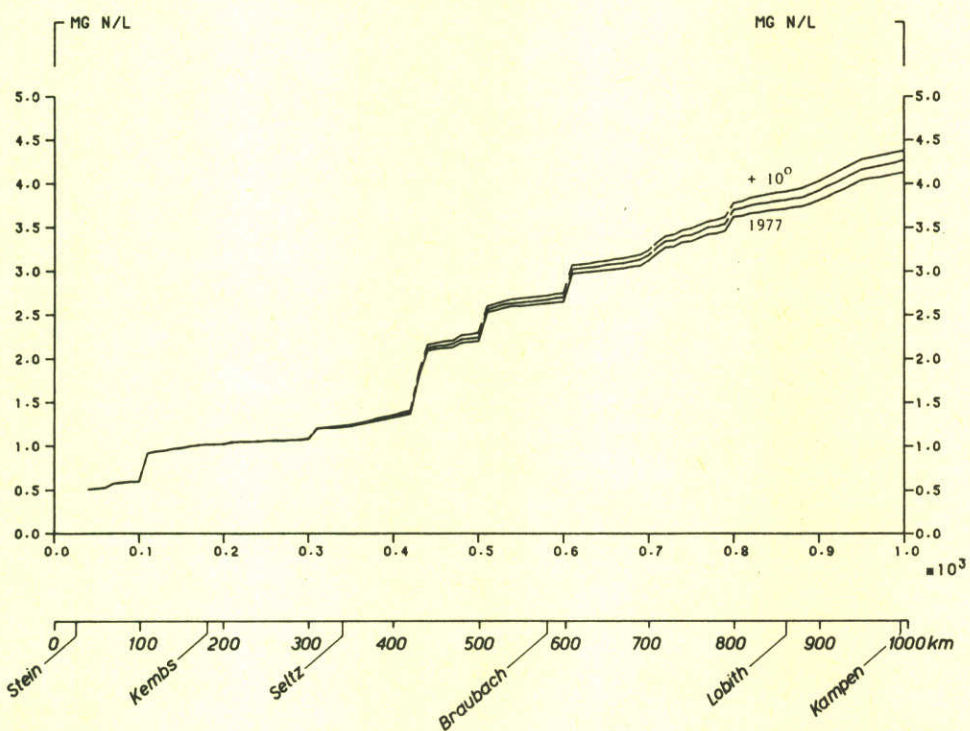


Invloed van temperatuur op zuurstof en BOD  
(jaargemiddelde 1977)

AMMONIUM-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



NITRAAT-STIKSTOF RIJN/IJSSEL 1977



0 100 200 300 400 500 600 700 800 900 1000 km  
 Stein Kembs Seltz Braubach Lobith Kampen

Invloed van temperatuur op ammonium en nitraat  
 (jaargemiddelde 1977)

A4

## BIJLAGE I

### Projectorganisatie (1-1-'78 tot 1-9-'81)

#### Stuurgroep Waterkwaliteitsmodellen Rijn en Maas

taak: aangeven hoofddoelstelling onderzoek, vaststellen budget, geven van opdrachten voor deelprojecten, verstrekken van informatie over beleid en beheer.

samenstelling: ir. W.H. Barentsen, (tot 1-6-'81) voorzitter, Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater  
ir. K.P. Blumenthal, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging  
ir. A.E. Brouwn, (vanaf 1-1-'79) Directie Bovenrivieren  
ir. J.H. Jansen, (vanaf 1-6-'81) voorzitter, Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater  
ir. H. de Jong, (tot 1-1-'79) Directie Bovenrivieren  
prof. dr. L. Lijklema, Technische Hogeschool Twente  
ir. M.E. Pot, (vanaf 16-11-'78) Directie Limburg  
ir. J.E. Prins, Waterloopkundig Laboratorium  
ir. P. Santema, Rijksinstituut voor Drinkwatervoorziening  
ir. R. Klomp, secretaris, Waterloopkundig Laboratorium

#### Projectgroep Waterkwaliteitsmodel Rijn

taak: formulering operationele doelstellingen onderzoek, toetsen voortgang, bewaken van budget, coördineren van deelprojecten.

samenstelling: drs. A.A. Beukema, (tot 1-9-'78) Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater  
ing. A.H.J. Dijkzeul, secretaris (vanaf 1-7-79) Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater  
ir. J.G. de Graan, (tot 1-10-80) Rijksinstituut voor Drinkwater-voorziening  
ir. R. Klomp, voorzitter, Waterloopkundig Laboratorium  
Dr. H.A.M. de Kruijf, (vanaf 1-1-80) Rijksinstituut voor Drinkwatervoorziening

BIJLAGE I (vervolg)

ir. J.B.H.J. Linders, Rijksinstituut voor Drinkwatervoorziening

ir. H.J. Opdam, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging

ir. M.C.M. van Oirschot, (vanaf 1-7-80) Rijksinstituut voor  
Zuivering van Afvalwater

ir. J.A. van Pagee, Waterloopkundig Laboratorium

ir. L. Postma, (vanaf 1-7-79) Waterloopkundig Laboratorium

dr. ir. H.M. van Schieveen, (tot 1-1-81) Dienst Informatie  
Verwerking

ir. B.G.M. van de Wetering, Rijksinstituut voor Zuivering van  
Afvalwater (tot 1-7-79 secretaris)



BIJLAGE II - Konsekwenties van de steady-state aanname

1. Het middelen van de differentiaalvergelijkingen

De algemene vorm van de massatransportvergelijkingen in MODQUAL is

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial(A_x D_L \frac{\partial c}{\partial x})}{A_x \Delta x} - \frac{\partial(A_x u c)}{A_x \Delta x} + \frac{S_c}{A_x \Delta x} + kc \quad (1)$$

In feite staan er meer termen in de vergelijkingen, waaronder interacties e.d.. De navolgende uitwerking wordt daardoor echter niet essentieel anders.

De betekenis van de symbolen in vgl. (1) is als volgt:

- $x(x,t)$  = toestandsvariabele (koncentratie)
- $A_x(x,t)$  = natte doorsnede
- $D_L(x,t)$  = dispersiecoëfficiënt
- $u(x,t)$  = stroomsnelheid
- $S_c(x,t)$  = belasting ten gevolge van lozingen van stof
- $k(x,t)$  = reaktieconstante
- $\Delta x$  = lengte beschouwd riviertrajekt
- $x$  = plaats
- $t$  = tijd.

Ten overvloede zij vermeld dat ook in vergelijking (1) reeds "gelumpede" parameters voorkomen. Er is namelijk in die vergelijking reeds geïntegreerd over een turbulente tijdschaal, over de vertikaal en over de breedte van de rivier. Inhomogeniteiten in tijd en plaats veroorzaken ook hier reeds niet goed determineerbare verstoringen van de termen, waarop hier echter niet verder wordt ingegaan. De dispersiecoëfficiënt  $D_L$  is een voorbeeld voor een op dergelijke wijze ontstane parameter.

De differentiaalvergelijking voor een deeltrajekt kan worden vereenvoudigd tot vgl. (2) indien  $A_x$ ,  $u$  en  $D_L$  over het trajekt konstant mogen worden verondersteld.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - u \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{S_c}{A_x \Delta x} + kc \quad (2)$$

Hierin is

$$c = c(x, t)$$

$$D_L = D_L(t)$$

$$u = u(t)$$

$$S_c = S_c(t)$$

$$A_x = A_x(t)$$

$$k = k(t).$$

Iedere tijdsafhankelijke functie  $f(t)$  wordt opgesplitst in een tijdsgemiddeld deel  $\bar{f}(t)$  en een fluktuatie  $f'(t)$  om deze tijdsgemiddelde of gladgestreken functie

$$f(t) = \bar{f}(t) + f'(t) \quad (3)$$

De definitie van het tijdsgemiddelde van een functie  $f(t)$  is

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} f(\tau) d\tau \quad (4)$$

zodat,

$$\frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} f'(\tau) d\tau = 0$$

Laten we nu eens nagaan wat er van vergelijking (2) terecht komt als alle termen over de tijd gemiddeld worden:

$$\frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \frac{\partial c}{\partial t} d\tau = \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \left( D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - u \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{S_c}{A_x \Delta x} + kc \right) d\tau$$

of

$$\overline{\frac{\partial c}{\partial t}} = \overline{D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}} - \overline{u \frac{\partial c}{\partial x}} + \overline{S_c / (A_x \Delta x)} + \overline{kc} \quad (5)$$

Substitutie van

$$c = \bar{c} + c'$$

$$D_L = \bar{D}_L + D'_L$$

$$u = \bar{u} + u'$$

$$S_c = \bar{S}_c + S'_c$$

$$A_x = \bar{A}_x + A'_x$$

$$k = \bar{k} + k'$$

in vergelijking (5) geeft met toepassing van de in annex A afgeleide produkt- en kotiëntregel (vgl. A.1 en A.3) de volgende relatie

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \bar{D}_L \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\bar{S}_c}{\bar{A}_x \Delta x} + \bar{k} \bar{c} + \overline{D'_L \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2}} - \overline{u' \frac{\partial c'}{\partial x}} +$$

(a)                      (b)

$$\frac{\bar{S}_c}{\bar{A}_x \Delta x} \left\{ \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^* - S_c^*) (A_x^*)^{2n+1}}{(A_x^* - S_c^*) (A_x^*)^{2n+1}} - \sum_1^{\infty} \frac{(A_x^* - S_c^*) (A_x^*)^{2n}}{(A_x^* - S_c^*) (A_x^*)^{2n}} \right\} + \overline{k' c'}$$

(c)                      (d)

waarbij

$$A_x^* = \frac{A'_x}{\bar{A}_x} \quad \text{en} \quad S_c^* = \frac{S'_c}{\bar{S}_c} .$$

Het zal duidelijk zijn dat vergelijking (6) in die zin van de oorspronkelijke vergelijking (2) verschilt, dat de grootheden vervangen zijn door tijdsgemiddelde grootheden plus een aantal extra termen (a, b, c, d) welke de bijdrage geven van de fluktuaties ten opzichte van deze tijdsgemiddelden.

Opgemerkt kan worden dat deze extra termen in het algemeen niet op eenvoudige wijze kunnen worden afgeschat. In paragraaf 3 zal evenwel een hypotetische situatie worden beschouwd waarvoor een afschatting van deze termen wel mogelijk blijkt te zijn.

De vraag werpt zich op hoe belangrijk de bijdrage van de verschillende termen is, wat ze voorstellen en wat de gevolgen zijn indien deze worden verwaarloosd.

In zijn algemeenheid kan worden verwacht dat de bijdragen van de extra termen gering is indien de fluktuaties ten opzichte van het tijdsgemiddelde klein zijn of indien de extra term wordt gevormd door een produkt van 2 ongekorreleerde variabelen.

Met betrekking tot een meer gedetailleerde beschouwing per term kan het volgende worden opgemerkt:

$$(a) \quad \overline{D'_L \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2}}$$

Deze term is afkomstig van fluktuaties in de dispersiekoëfficiënt welke voornamelijk kunnen worden veroorzaakt door variaties in het debiet (stroomsnelheid en dwarsdoorsnede).

De term zal over het algemeen verwaarloosbaar zijn, aangezien het dispersief transport in snel stromende rivieren veelal van ondergeschikt belang is. Aangetoond kan worden dat onder stationaire omstandigheden het dispersief transport verwaarloosbaar is indien  $k D_L/u^2 \ll 1$ .

In de Rijn wordt hieraan ruimschoots voldaan:  $k D_L/u^2 < 0,005$ .

Voor rivieren, waarin deze term niet verwaarloosbaar is, lijkt het mogelijk de invloed van deze term onder te brengen in een tijdsgemiddelde 'overall' dispersiekoëfficiënt, analoog aan de wijze waarop dat bij middeling over de dwarsdoorsnede heeft plaatsgevonden.

$$(b) \quad \overline{-u' \frac{\partial c'}{\partial x}}$$

Deze term is afkomstig van het instationaire gedrag van de stroomsnelheid.

Een bijdrage van deze term is derhalve voornamelijk te verwachten indien het debiet niet konstant is en de stroomsnelheid een functie is van het debiet.

$$(c) \quad \frac{\bar{S}_c}{\bar{A}_x \Delta x} \left\{ \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^* - S_c^*)(A_x^*)^{2n+1}}{A_x^*} - \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^* - S_c^*)(A_x^*)^{2n}}{A_x^*} \right\}$$

Deze term is een gevolg van fluktuaties in de belasting (lozingen) en de dwarsdoorsnede welke nauw gerelateerd is aan het afvoerdebiet.

Het volgende kan worden opgemerkt:

- de term is nul indien de dwarsdoorsnede (afvoer) konstant is ( $A_x^* = 0$ ) ook al is de belasting variabel ( $S_c^* \neq 0$ )
- de term is nul indien  $A_x^* = S_c^*$ . Deze eigenschap lijkt enigszins merkwaardig, eenvoudig is evenwel in te zien dat indien de stroomsnelheid konstant is deze eigenschap impliceert dat,

$$\frac{S'_c}{\bar{S}_c} = \frac{A'_x}{\bar{A}_x} = \frac{u A'_x}{\bar{A}_x} = \frac{Q'}{\bar{Q}}$$

Dit is o.a. het geval indien de concentratie van de lozing konstant is en het lozingsdebiet ( $Q_L$ ) evenredig varieert met het debiet ( $Q$ ) in de rivier. In het algemeen geldt namelijk  $S_c = c_0 Q_L$ , waarbij  $c_0$  de concentratie in de lozing is

- indien de lozingsbelasting in tegenstelling tot de vorige eigenschap volledig ongekorreleerd is met de afvoer of konstant is ( $S_c^* = 0$ ) dan kan de term worden gereduceerd tot

$$\frac{\bar{S}_c}{\bar{A}_x \Delta x} \left\{ \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^*)^{2n+2}}{\Delta x} - \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^*)^{2n+1}}{\Delta x} \right\}$$

Hieruit kan worden afgeleid dat alleen een variatie in de dwarsdoorsnede (afvoer) reeds leidt tot een bijdrage in deze term.

Verder kan nog worden opgemerkt dat, indien de variatie van de dwarsdoorsnede symmetrisch is verdeeld ten opzichte van het tijdsgemiddelde, de 2e reeks gelijk is aan nul. In dat geval levert deze term een positieve bijdrage. In zijn algemeenheid zal de grootte en het teken van de bijdrage dus tevens afhangen van de verdeling van de fluktuaties in de afvoer ten opzichte van het tijdsgemiddelde.

(d)  $k'c'$

Deze term betreft de bijdrage van de variaties in de reaktiekonstante welke veroorzaakt kunnen worden door bijvoorbeeld temperatuurvariaties.

Aangezien over het algemeen de reaktiekonstanten als kalibratieparameters worden gebruikt zal bij verwaarlozing van de extra termen in vergelijking (6) een 'lumping' plaatsvinden in deze parameters, waardoor de gekalibreerde reaktiekonstanten tevens afhankelijk zijn van de fluktuaties van de verschillende grootheden.

Bij toepassing van een dergelijk gekalibreerd model voor een periode waarin de fluktuatie wezenlijk verschillen ten opzichte van de kalibratieperiode, zullen derhalve diskrepancies kunnen ontstaan. Het is evident dat dergelijke diskrepancies ook voor kunnen komen bij modellering van conservatieve stoffen waarvoor geen daadwerkelijke kalibratiemogelijkheden aanwezig zijn, tenzij dispersie belangrijk is.

## 2 Overgang naar de steady-state vergelijking

In de vorige paragraaf is de dynamische differentiaalvergelijking continue gemiddeld over een tijdsinterval  $[t, t+\theta]$  waarbij de tijd  $t$  een continue functie is. Indien echter diskreet wordt gemiddeld over één enkel interval  $[t_1, t_1+\theta]$  dan zijn de aldus gemiddelde grootheden per definitie tijdsonafhankelijk.

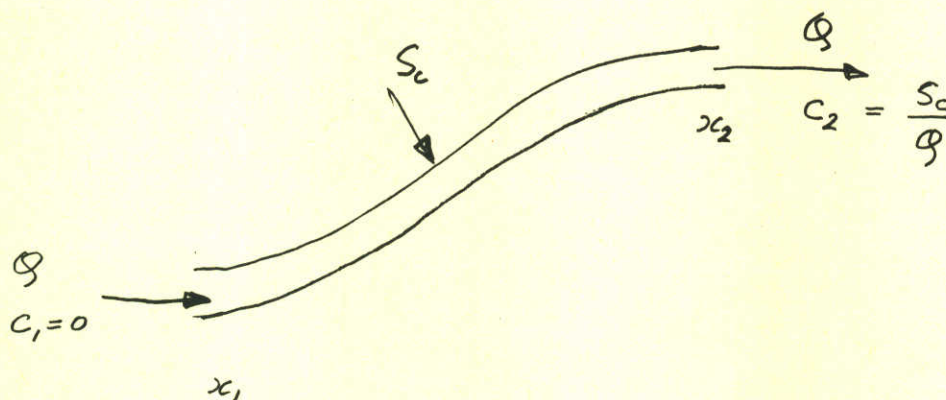
Dit impliceert dat  $\partial \bar{c} / \partial t = 0$ , zodat de tijdsgemiddelde vergelijking (6) overgaat in een steady-state vergelijking waarbij tevens de partiële afgeleiden kunnen worden vervangen door gewone afgeleiden. De steady-state vergelijking luidt dan:

$$0 = \bar{D}_L \frac{d^2 \bar{c}}{dx^2} - \bar{u} \frac{d\bar{c}}{dx} + \frac{\bar{S}_c}{\bar{A}_x \Delta x} + \bar{k}\bar{c} + \text{extra-termen} \quad (7)$$

Het is gebruikelijk om bij toepassing van deze vergelijking de extra-termen te verwaarlozen. Dit heeft tot gevolg dat de parameters die via kalibratie (parameterschatting) worden bepaald een zekere verdiskontering in zich hebben (lumping).

### 3 Beschouwing van een variabele afvoer en temperatuur

In het onderstaande zal een hypotetische situatie worden beschouwd ten einde de invloed van het verwaarlozen van de resttermen in de steady-state vergelijking te kwantificeren. Hiertoe wordt een deel van de rivier beschouwd waarop een lozing plaatsvindt over het traject  $(x_1, x_2)$ , zie fig. 1).



Figuur 1 Lozing op een riviertraject

De volgende veronderstellingen worden gedaan:

- dispersie verwaarloosbaar ( $D_L = 0$ )
- stof is conservatief ( $k = 0$ )
- afvoer ( $Q$ ) is konstant                      dwarsdoorsnede ( $A_x$ ) is konstant
- stroomsnelheid ( $u$ ) is konstant
- lozing ( $S_c$ ) is konstant (stel bijdrage aan  $Q$  nihil)
- beginkoncentratie is konstant (stel  $c_1 = 0$  voor  $x < x_1$ ).

Voor dit stationaire geval kan de oorspronkelijke dynamische vergelijking (2) worden gereduceerd tot

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0 = -u \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{S_c}{A_x \Delta x} \quad (8)$$

zodat,

$$u \frac{dc}{dx} = \frac{S_c}{A_x \Delta x} \rightarrow \frac{dc}{dx} = \frac{S_c}{u A_x \Delta x}$$

integratie over  $(x_1, x_2)$  geeft,

$$c_2 = c = \frac{S}{A_x} \frac{c}{u} = \frac{S}{Q} c$$

In het onderstaande zal vervolgens worden aangenomen dat de afvoer niet konstant is maar veranderd in de tijd.

Het verloop van de afvoer over de tijd wordt geschematiseerd door een sprongfunctie, zoals is aangegeven in figuur 2a.

De overgang van lage ( $Q_1$ ) naar hoge ( $Q_2$ ) afvoer op  $t = \frac{1}{2}T$  wordt verondersteld vele malen sneller te verlopen dan de looptijd ( $\Delta x/u$ ) over het lozingstrajekt. Deze stationaire situatie zal op 3 verschillende wijzen worden benaderd, te weten:

- A. oplossing via 2 'dynamische' berekeningen te weten voor  $0 < t < \frac{1}{2}T$  en voor  $\frac{1}{2}T < t < T$
  - B. oplossing via een steady-state berekening
  - C. oplossing via een steady-state berekening inclusief het gebruik van de in paragraaf 1 afgeleide extra-termen.
- A. Voor de oplossing via 2 'dynamische' berekeningen kan direkt gebruik worden gemaakt van de via vergelijking (8) verkregen oplossing voor konstante afvoer. Toepassing van deze oplossing voor  $x = x_2$  geeft voor

$$0 < t < \frac{1}{2}T \quad c_2 = \frac{S}{Q_1} c$$

$$\frac{1}{2}T < t < T \quad c_2 = \frac{S}{Q_2} c$$

De gemiddelde concentratie van deze periode is derhalve gelijk aan

$$\bar{c}_2 = \frac{1}{2} \left( \frac{S}{Q_1} c + \frac{S}{Q_2} c \right) \quad (9)$$

Zie tevens figuur 2b.

- B. Uit vergelijking (7) is af te leiden dat de 'gewone' (zonder extra-termen) steady-state vergelijking voor dit geval overgaat in

$$0 = -\bar{u} \frac{d\bar{c}}{dx} + \frac{S}{A_x} \frac{c}{\Delta x}$$

zodat,



$$\bar{c}_2 = \frac{S_c}{\bar{Q}} \quad (10)$$

Zie tevens figuur 2c.

C. Uit vergelijking (6) is af te leiden dat voor dit geval de extra-termen die aan de steady-state vergelijking dienen te worden toegevoegd, slechts één term omvat welke afkomstig is van de variaties in de dwarsdoorsnede zodat,

$$0 = -u \frac{d\bar{c}}{dx} + \frac{S_c}{\bar{A}_x \Delta x} + \frac{S_c}{\bar{A} \Delta x} \left\{ \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^*)^{2n+2}}{\bar{Q}} - \sum_0^{\infty} \frac{(A_x^*)^{2n+1}}{\bar{Q}} \right\}$$

Indien de stroomsnelheid konstant wordt veronderstelt, geldt

$$\frac{Q'}{\bar{Q}} = \frac{A_x'}{\bar{A}_x} = A_x^*$$

verder is Q symmetrisch verdeeld om  $\bar{Q}$  zodat de 2e reeks met oneven exponenten nul is, derhalve is af te leiden

$$\frac{d\bar{c}}{dx} = \frac{S_c}{\bar{Q} \Delta x} + \frac{S_c}{\bar{Q} \Delta x} \sum_0^{\infty} \frac{(Q')^{2n+2}}{\bar{Q}} = \frac{S_c}{\bar{Q} \Delta x} \left\{ 1 + \frac{(Q')^2}{\bar{Q}} + \frac{(Q')^4}{\bar{Q}} + \dots \right\}$$

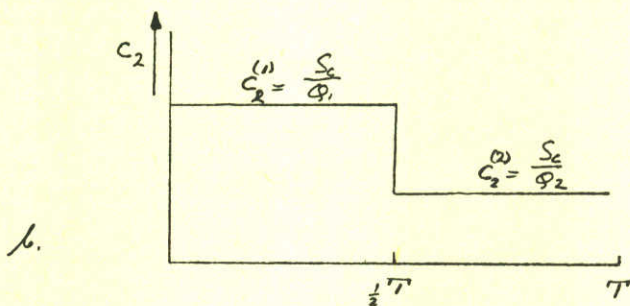
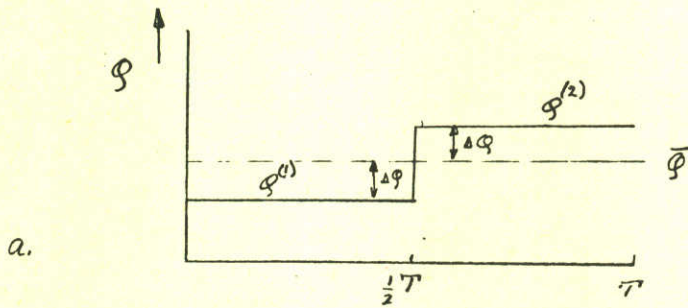
met  $Q' = \Delta x$  geeft integratie over  $(x_1, x_2)$

$$\bar{c} = \frac{S_c}{\bar{Q}} \left\{ 1 + \left(\frac{\Delta Q}{\bar{Q}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta Q}{\bar{Q}}\right)^4 + \dots \right\} = \frac{S_c}{\bar{Q}} \cdot \frac{1}{1 - \left(\frac{\Delta Q}{\bar{Q}}\right)^2}$$

$$\bar{c} = S_c \frac{\bar{Q}}{(\bar{Q} + \Delta Q)(\bar{Q} - \Delta Q)} \quad (11)$$

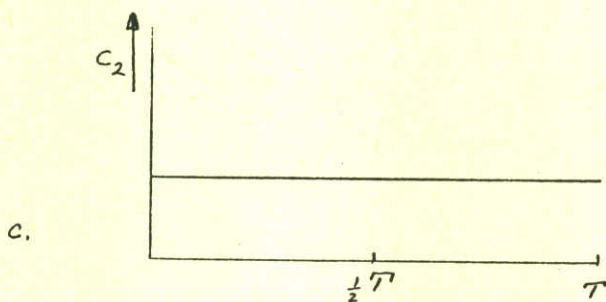
Aangezien  $Q_1 = \bar{Q} - \Delta Q$  en  $Q_2 = \bar{Q} + \Delta Q$  is deze oplossing gelijk aan de via 2 'dynamische' berekeningen verkregen oplossing (vgl. (9)).

Zie tevens figuur 2d.



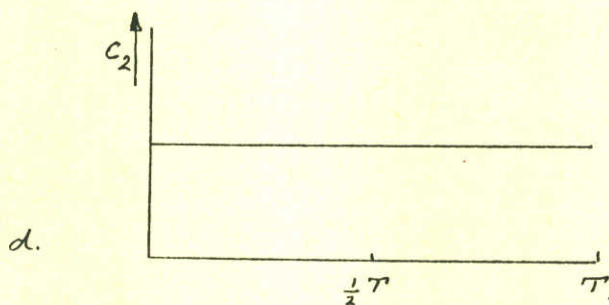
dynamische vgl. (A)

$$\bar{c}_2 = \frac{1}{2} \left( \frac{S_c}{\phi_1} + \frac{S_c}{\phi_2} \right)$$



steady state vgl. (B)

$$\bar{c}_2 = \frac{S_c}{\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2)}$$



steady state vgl. + extra termen (C)

$$\bar{c}_2 = S_c \frac{\bar{\phi}}{(\bar{\phi} + \Delta\phi)(\bar{\phi} - \Delta\phi)}$$

Berekende concentraties via de methoden A, B en C bij een dynamisch afvoerregime

A4

Uit een vergelijk van de oplossingen verkregen middels de 3 verschillende methoden kan worden opgemaakt dat het gebruik van de steady-state vergelijking met de extra termen (C) hetzelfde resultaat geeft als het gebruik van de dynamische vergelijking (A). Het resultaat van de 'gewone' steady-state vergelijking (B) wijkt hiervan af. De grootte van deze afwijking is afhankelijk van de grootte van de variaties in het debiet.

#### Meer algemene beschouwing

In een vervolg op de hierboven beschreven hypotetische situatie is een iets algemenere beschouwing gedaan voor zowel konservatieve stoffen als stoffen met 1e orde afbraak of produktie.

Wederom is aangenomen dat het debiet beschreven kan worden met een sprongfunctie zoals is aangegeven in figuur 2a.

Achtereenvolgens zijn 3 verschillende hydraulische kondities beschouwd.

1.  $A_x = \text{konstant}$        $u \div Q$
2.  $A_x \div Q^{0,5}$        $u \div Q^{0,5}$
3.  $A_x \div Q$        $u = \text{konstant.}$

Berekend zijn de procentuele afwijkingen die bij het gebruik van de 'gewone' steady-state vergelijking worden gemaakt ten opzichte van het resultaat van de dynamische vergelijking of steady-state vergelijking + extra termen.

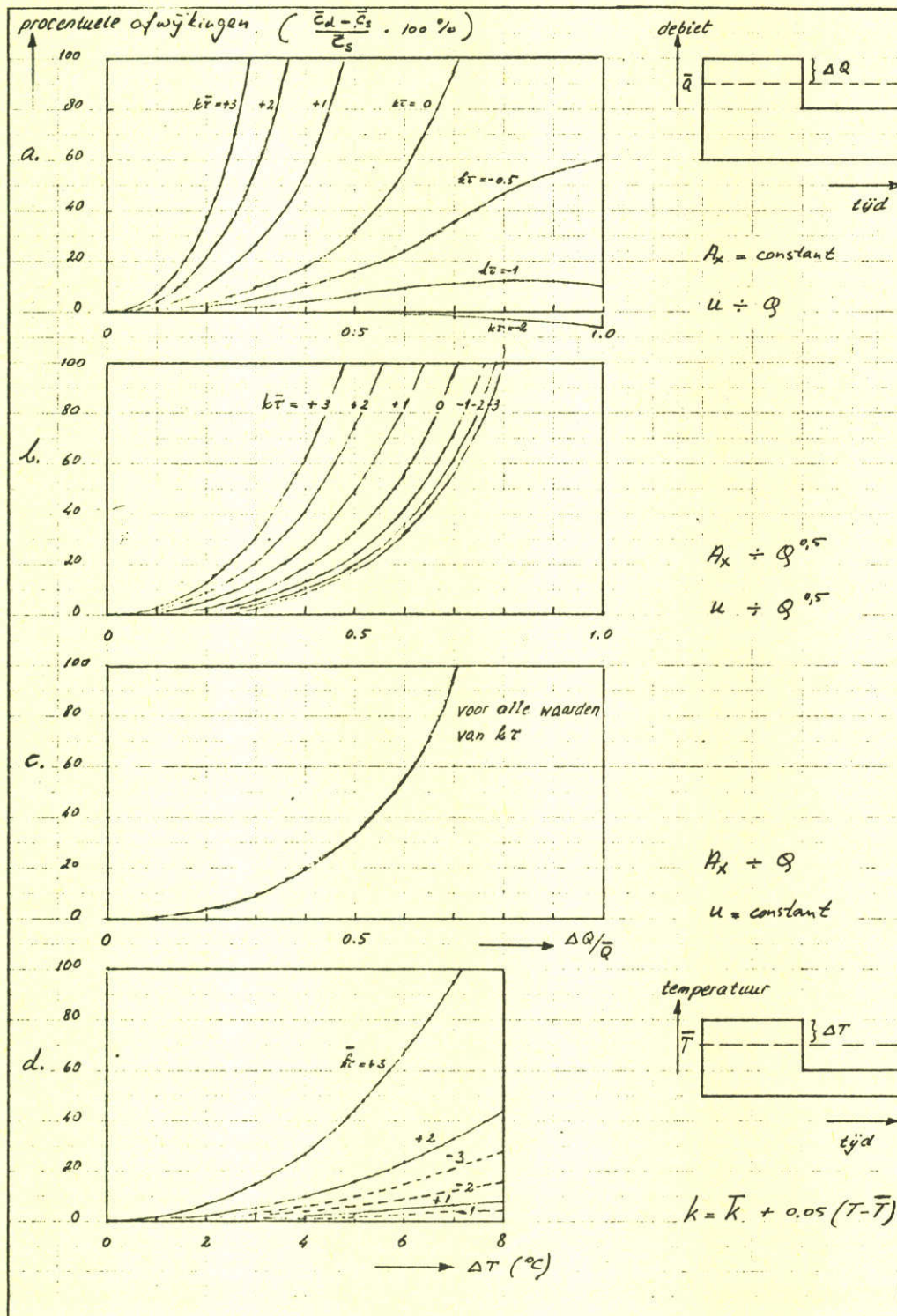
De procentuele afwijking is gelijk gesteld aan:

$$\text{proc. afw.} = \frac{\bar{c}_d - \bar{c}_s}{\bar{c}_s} \cdot 100\%$$

waarbij  $\bar{c}_d$  de gemiddelde concentratie is zoals die wordt verkregen via de dynamische berekening en  $\bar{c}_s$  de concentratie zoals die wordt berekend via de steady-state vergelijking.

In figuur 3a,b,c zijn de resultaten voor de procentuele afwijkingen uitgezet tegen de relatieve debietvariatie ( $\Delta Q/\bar{Q}$ ) voor verschillende waarden van  $k \bar{\tau}$  en onder verschillende hydraulische kondities.

$\bar{\tau}$  is de gemiddelde stroomtijd over het lozingstrajekt.



Procentuele afwijkingen tussen de steady state berekening ( $c_s$ ) en de dynamische berekening ( $c_d$ ) van de gemiddelde concentraties.

Met betrekking tot de figuren kan het volgende worden opgemerkt:

- de afwijkingen zijn over het algemeen positief waardoor een steady-state model een gemiddeld lagere concentratie zal voorspellen dan een dynamisch model
- de afwijkingen zijn voor stoffen met afbraak ( $k < 0$ ) geringer dan voor konservatieve stoffen ( $k = 0$ ) of stoffen met produktie ( $k > 0$ )
- voor stoffen met produktie zijn de afwijkingen groter dan voor konservatieve stoffen en stoffen met afbraak
- indien de stroomsnelheid sterker afhangt van het debiet is er een grotere invloed van de reaktiekonstante ( $k$ ) op de grootte van de afwijkingen
- indien de stroomsnelheid konstant is, zijn de procentuele afwijkingen voor zowel stoffen met produktie als afbraak gelijk aan die voor konservatieve stoffen
- de procentuele afwijkingen voor konservatieve stoffen worden niet beïnvloed door hydraulische kondities.

Tevens zijn berekeningen gedaan met betrekking tot variaties in de temperatuur. Evenals bij de variatie van de afvoer is een sprongfunctie verondersteld.

Aangenomen is dat,

$$k_{1,2} = \bar{k} \pm 0,05 \Delta T$$

De aldus berekende afwijkingen van de steady-state oplossing ten opzichte van de dynamische zijn voor verschillende  $\bar{k}$   $\tau$ -waarden uitgezet in figuur 3d.

Opmerkelijk is dat de afwijkingen, zowel voor stoffen met afbraak als stoffen met produktie, positief zijn.

#### 4 Konklusies met betrekking tot toepasbaarheid steady-state model

Als gevolg van het over de tijd middelen van de oorspronkelijke tijdsafhankelijke differentiaalvergelijkingen ontstaan vergelijkingen die tijdsgemiddelde grootheden bevatten en een aantal extra termen die afkomstig zijn van de eventuele fluktuaties van deze grootheden.

Het verwaarlozen van deze extra termen kan leiden tot afwijkingen van de berekende waarden ten opzichte van de gemeten waarden of tot een onvolledige kalibratie van parameters.

Deze afwijkingen kunnen voornamelijk worden veroorzaakt door:

1. variaties in lozingen
2. variaties in het afvoerdebiet
3. variaties in de temperatuur.

ad 1.

Voorzover het huishoudelijke of industriële lozingen betreft zijn de variaties veelal niet bekend. Indien mag worden aangenomen dat de eventuele variaties van deze lozingen volledig ongekorreleerd is met de afvoer, dan zijn de afwijkingen ten gevolge van deze variaties gering. Indien het diffuse lozingen (runoff e.d.) betreft, zijn de mogelijke afwijkingen gering als de variatie van deze lozingen evenredig is met de afvoer in de rivier ('achtergrondconcentratie' debietonafhankelijk).

De mogelijke afwijkingen ten gevolge van variaties in lozingen is derhalve moeilijk af te schatten.

ad 2.

De variaties in het debiet hebben enerzijds tot gevolg dat de concentratie verandert ten gevolge van een verandering in de mate van verdunning. Anderzijds is er bij niet konservatieve stoffen de invloed van een verandering in de stroomtijd, alsmede een mogelijke verandering in reaktiekonstanten (b.v. reaeratie, bezinking).

Het verdunningsaspect heeft tot gevolg dat het steady-state model over het algemeen een lagere gemiddelde concentratie voorspelt dan uit het middelen van de concentraties uit een dynamisch model is af te leiden. Het stroomtijdaspect heeft tot gevolg dat deze afwijkingen voor stoffen met produktie en afbraak respektievelijk groter en kleiner zijn dan voor konservatieve stoffen.

De afwijkingen bij een stof met produktie zijn groter indien de stroomtijd sterker afhankelijk is van het debiet. Dit is met name in stuwpannen het geval waar de stroomsnelheid nagenoeg evenredig is met de afvoer.

Over het algemeen kan worden gesteld dat bij debietvariaties van zo'n 40% ten opzichte van het gemiddelde, rekening moet worden gehouden met afwijkingen in de orde van 0 - 20% voor stoffen met afbraak, 20% voor konservatieve stoffen en 20 - 100% voor stoffen met produktie.

Opgemerkt dient te worden dat de afwijkingen worden gereduceerd indien de lozingen recht evenredig afhankelijk zijn met het afvoerdebiet, hetgeen met name voor de belastingsbijdrage van runoff het geval kan zijn.

ad 3.

De variaties in temperatuur hebben voornamelijk een verandering van de reactieconstante tot gevolg. Alleen bij zuurstof is de temperatuursafhankelijkheid enigszins gekompliceerder. De mogelijke afwijkingen ten gevolge van een steady-state beschouwing hangen mede af van de temperatuursafhankelijkheid van de reactieconstanten.

Bij een temperatuursprong van 5°C kunnen afwijkingen voorkomen in de orde van 0 - 20%.

Mede naar aanleiding van het hierboven vermelde kan worden gekonkludeerd dat het toepassen van een steady-state model met de nodige voorzichtigheid dient te geschieden, waarbij vooral de variatie in de afvoer een belangrijk criterium vormt.

Annex A: Afleiding van de produkt- en kotiëntregel voor twee variabele grootheden

Per definitie geldt:

$$u = \bar{u} + u', \text{ waarbij } \bar{u} \stackrel{\text{def}}{=} \int_t^{t+\theta} u \, d\tau \quad (\text{zodat } \overline{u'} = 0)$$

$$v = \bar{v} + v', \text{ waarbij } \bar{v} \stackrel{\text{def}}{=} \int_t^{t+\theta} v \, d\tau \quad (\text{zodat } \overline{v'} = 0)$$

1. Produktregel: Het tijdsgemiddelde van het produkt van twee funkties u en v

$$\begin{aligned} \overline{uv} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} uv \, d\tau = \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} (\bar{u}+u')(\bar{v}+v') \, d\tau = \\ &= \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \bar{u} \cdot \bar{v} \, d\tau + \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} (\bar{u} \cdot v' + \bar{v} \cdot u') \, d\tau + \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} u'v' \, d\tau = \\ &= \bar{u} \cdot \bar{v} + \underbrace{\overline{u'v'}}_{\text{extra term}} \end{aligned} \quad (\text{A-1})$$

2. Kotiëntregel: Het tijdsgemiddelde voor het kotiënt van twee funkties u en v

$$\begin{aligned} \overline{u/v} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \frac{u}{v} \, d\tau = \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \frac{\bar{u} + u'}{\bar{v} + v'} \, d\tau = \\ &= \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \frac{\bar{u}}{\bar{v}} \left( 1 + \frac{u'}{\bar{u}} \right) \frac{1}{1 + \frac{v'}{\bar{v}}} \, d\tau \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

Het rechterlid is in het algemeen niet verder uit te werken. Indien echter geldt

$$\left| \frac{v'}{\bar{v}} \right| < 1$$

is een reeksontwikkeling mogelijk volgens  $\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 \dots |x| < 1$ . Indien de fluktuaties in absolute zin dus veel kleiner zijn dan de gemiddelde funktie is (I.2) te schrijven als



$$\begin{aligned}
\frac{\bar{u}}{\bar{v}} &= \frac{\bar{u}}{\bar{v}} \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \left( 1 + \frac{u'}{\bar{u}} \right) \left( 1 - \frac{v'}{\bar{v}} + \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^2 - \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^3 + \dots \right) d\tau = \\
&= \frac{\bar{u}}{\bar{v}} \frac{1}{\theta} \int_t^{t+\theta} \left[ 1 + \sum_0^{\infty} \left( \frac{v'}{\bar{v}} - \frac{u'}{\bar{u}} \right) \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^{2n+1} - \sum_0^{\infty} \left( \frac{v'}{\bar{v}} - \frac{u'}{\bar{u}} \right) \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^{2n} \right] d\tau = \\
&= \frac{\bar{u}}{\bar{v}} + \frac{\bar{u}}{\bar{v}} \left\{ \sum_0^{\infty} \overline{\left( \frac{v'}{\bar{v}} - \frac{u'}{\bar{u}} \right) \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^{2n+1}} - \sum_0^{\infty} \overline{\left( \frac{v'}{\bar{v}} - \frac{u'}{\bar{u}} \right) \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^{2n}} \right\} \quad (A-3)
\end{aligned}$$

-----  
 extra termen

De tweede reeks in de extra term kan worden vereenvoudigd aangezien

$$\overline{\left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)} = 0 \text{ en } \overline{\left( \frac{u'}{\bar{u}} \right)} = 0 \quad (\text{zie definitie})$$

Dit impliceert dat in deze reeks de term behorend bij  $n = 0$  gelijk nul is.

Een verdere vereenvoudiging is mogelijk indien wordt aangenomen dat  $v$  symmetrisch is verdeeld ten opzichte van  $\bar{v}$ . In dat geval is namelijk af te leiden dat

$$\overline{\left( \frac{v'}{\bar{v}} \right) \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^{2n}} \approx 0$$

Een verdere vereenvoudiging van de extra termen is mogelijk indien  $u$  en  $v$  volledig ongekorreleerd zijn, dan geldt namelijk

$$\overline{\left( \frac{u'}{\bar{u}} \right) \left( \frac{v'}{\bar{v}} \right)^m} \approx 0$$

Verder kan worden opgemerkt dat indien  $u$  en  $v$  zodanig gekorreleerd zijn dat

$$\frac{v'}{\bar{v}} = \frac{u'}{\bar{u}}$$

dan zijn de beide extra termen gelijk nul.

p.o. box 177

2600 mh delft

the netherlands