

Z4298.00

Opdrachtgever:

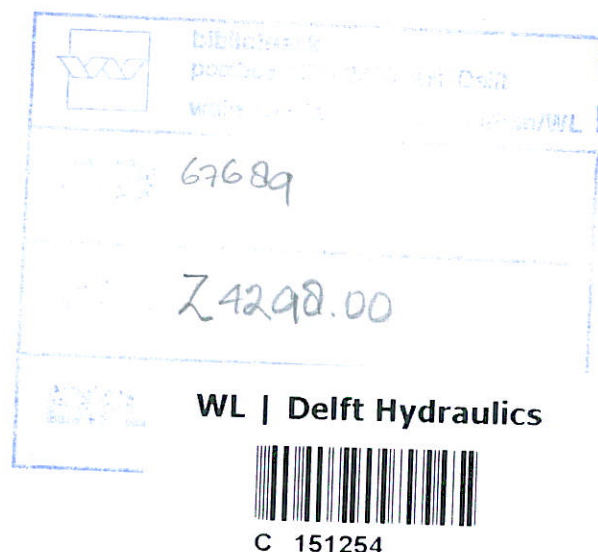
RIKZ Haren

Vrachten van stoffen naar het Waddenzeegebied

Methodiek van de vrachtberekening

Deelrapport 1 van 2

december 2006



Opdrachtgever:

RIKZ Haren

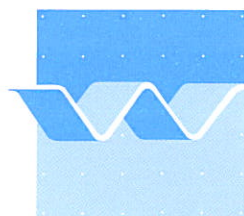
Vrachten van stoffen naar het Waddenzeegebied

Methodiek van de vrachtberekening

Loana Arentz, Johan Boon, Jos van Gils en Henk van den
Boogaard

Deelrapport 1 van 2

december 2006



wL | delft hydraulics

OPDRACHTGEVER:	RIKZ Haren				
TITEL:	Vrachten van stoffen naar het Waddenzeegebied. Deelrapport 1 van 2: Methodiek van de vrachtberekening.				
SAMENVATTING:					
Voor een nauwkeurige schatting van de jaar/seizoensvracht door een spuisluis zouden idealiter debieten en stofconcentratie metingen dagelijks beschikbaar moeten zijn. Daggemiddelde spuidebieten zijn over het algemeen beschikbaar, echter de kostbare toxische stoffen metingen hebben een veel lagere meetfrequentie. Om op basis van een beperkt aantal metingen toch jaar/seizoensvrachten te kunnen bepalen, zijn er in de literatuur diverse schattingsmethoden opgesteld die de "gaten" in het concentratieverloop middels interpolatie of extrapolatietechnieken opvullen. In een eerdere studie naar de betrouwbaarheid van deze berekeningsmethodieken is geconcludeerd dat zowel de bemonsteringsfrequentie en schattingsmethode van grote invloed zijn op de nauwkeurigheid en betrouwbaarheid van de schattingen van de jaarvracht. Er dient hierbij vermeld te worden dat geen van de schattingsmethoden kwantitatief de onzekerheid in de schatting van de jaarvracht kan weergeven en dat slechts een pragmatische indicatie van het betrouwbaarheidsinterval kan worden aangegeven. De onzekerheid in de schatting van een jaar/seizoensvracht is direct gekoppeld aan de onzekerheid in het geschatte tijdsverloop van de concentratie over de vrachtberekeningsperiode. Ofwel, optimalisatie van het invullen van de "gaten" in de concentratietijdreeks zal beloond worden met een kleinere onzekerheid. In dit deelrapport is een voorstel gedaan om op grond van stoffeigenschappen, systeemkennis en het gebruik van een stof, het concentratieverloop te kunnen afleiden bij de afwateringspunten. Vervolgens zijn drie voorstellen geschetst om de jaar/seizoensvracht te schatten op basis van een pragmatische methode waarmee een globale indicatie kan worden gegeven van de vracht en onzekerheid en een meer generieke stochastische methode, waarin de stoffeigenschappen, systeemkennis en alle historische meetinformatie worden vertaald naar een aantal statistische kentallen. Het voordeel van de laatste methode is dat het een kwantitatief raamwerk biedt voor het schatten van de vrachten en diens onzekerheid. In het verlengde biedt de methode uitgesproken perspectieven om vast te stellen hoeveel en wanneer er gemeten moet worden om te voldoen aan een van te voren vastgestelde marge van onzekerheid in de jaar/seizoensvracht. Vooralsnog is het echter onzeker of de historische gegevens voldoende zijn om de benodigde statistische kentallen te kwantificeren.					
REFERENTIES:	opdrachtbon: 4500061215				
VER	AUTEUR	DATUM	OPMERK.	REVIEW	GOEDKEURING
1	L. Arentz	29-12-2006		A. Nolte	T. Schilperoort
2	L. Arentz	23-03-2007		A. Nolte	T. Schilperoort <i>sc. Aug</i>
PROJECTNUMMER:		Z4298.00			
TREFWOORDEN:		vrachtberekeningsmethodieken, vrachten; spuisluizen, stochastisch model.			
AANTAL BLADZIJDEN:		24			
VERTROUWELIJK:		☐ JA ☒ NEE			
STATUS:		☐ VOORLOPIG ☐ CONCEPT ☒ DEFINITIEF			

Inhoud

1	Inleiding	1—1
1.1	Achtergrond	1—1
1.2	Doelstelling	1—1
1.3	Opzet van de studie	1—2
1.4	Leeswijzer	1—2
1.5	Verantwoording	1—2
2	Beschikbare gegevens	2—1
3	Vrachtberekeningsmethoden	3—1
3.1	Achtergrond	3—1
3.2	Schattingsmethodieken	3—2
3.3	Betrouwbaarheid	3—4
4	Aanpak	4—1
4.1	Inleiding	4—1
4.2	Rechttoe-rechtaan methode	4—3
4.3	Systeemmethode	4—4
4.4	Stochastisch model	4—5
5	Samenvatting en Conclusies	5—1

Literatuur

A Bemonsteringslocaties waterkwaliteit

I Inleiding

I.1 Achtergrond

In verband met onder andere de implementatie van de Europese Kaderrichtlijn Water (KRW) dienen voor een aantal prioritaire stoffen de bronnen, paden en lotgevallen in de Nederlandse kustwateren in kaart gebracht te worden. Hierbij behoren ook de Waddenzee en het Nederlands gedeelte van de Eems-Dollard. Het beheer van dit gebied is in handen van Rijkswaterstaat Noord-Nederland. Het beheer van de waterkwaliteit wordt onder meer vorm gegeven door het streven naar het behalen van de waterkwaliteitsdoeleinden zoals vastgelegd in de Vierde Nota Waterhuishouding (NW4).

Zowel voor de KRW als voor de NW4 is het allereerst van belang te weten hoe groot de aanvoer is van verschillende prioritaire stofgroepen vanuit bovenstroomse zoetwater aanvoerroutes naar het Waddenzeegebied. Vervolgens kan hiermee de relatieve bijdrage van de zoetwatervracht ten opzichte van andere vrachten naar het Waddenzee gebied zichtbaar worden gemaakt.

Als eenmaal de bronneninventarisatie beschikbaar is, dan zijn waterkwaliteitsmodellen uitstekend in staat om de paden en lotgevallen van prioritaire stoffen te berekenen in zowel de Waddenzee, Eems-Dollard als de Nederlandse kustzone. Hierbij zijn waterkwaliteitsmodellen in staat de relatieve bijdrage van verschillende emissiebronnen in de Waddenzee en kustzone te bepalen, en te berekenen hoe groot de in- en uitgaande fluxen zijn van de prioritaire stoffen voor de KRW-deelgebieden. Het laatste is van belang om afwentelingsvragen te beantwoorden.

I.2 Doelstelling

Het doel van deze studie is het kwantificeren van de vrachten van een zevental stofgroepen, vanuit de bovenstroomse zoete deelstroomgebieden op het Waddenzeegebied (Waddenzee en Eems-Dollard) op basis van veldmetingen in het water en zwevend stof, uitgevoerd in het najaar van 2005 bij spuispunten langs het gebied.

Daarnaast is een aantal nevendoelen geformuleerd die hier rechtstreeks uit voortvloeien:

- vergelijking tussen de gespuide vracht, per stofgroep en per spuislocatie die getransporteerd wordt via adsorptie aan zwevend stof en opgelost in de waterfase
- onderlinge vergelijking van de jaarvrachten per gemeten stofgroep en per spuislocatie
- advies ter verbetering van deze vrachtenstudie in voorbereiding op een potentieel vervolg van deze studie

I.3 Opzet van de studie

Om de doelstelling te realiseren zijn in deze studie de volgende 3 taken geformuleerd:

1. Overzicht van methodieken van de vrachtberekening.
2. Inventarisatie van de gegevens.
3. Vrachtberekening en analyse.

Dit deelrapport beschrijft de resultaten van activiteit 1 als basis voor de uitvoering van taak 2 en 3. Hiertoe zullen de resultaten van dit deelonderzoek met de opdrachtgever worden besproken om te beziën welke aanpak in het vervolg van deze studie het meest passend is gegeven de randvoorwaarden van dit project.

I.4 Leeswijzer

Allereerst wordt in hoofdstuk 2 een globaal overzicht gegeven van de beschikbare gegevens. Hoofdstuk 3 geeft een samenvatting van een aantal vrachtberekeningsmethodieken uit de literatuur. In hoofdstuk 4 wordt een aantal berekeningsmethodieken geschetst op basis van systeem- en stofkennis. Tenslotte bevat hoofdstuk 5 de samenvatting en conclusies.

I.5 Verantwoording

De studie wordt uitgevoerd door L. Arentz, J.A.G. van Gils en met bijdrage van H.F.P. van den Boogaard en J.G. Boon. Van de zijde van de opdrachtgever zijn dhr. J. Åkerman en B. Bellert de projectbegeleiders.

2 Beschikbare gegevens

In het najaar van 2005 is op een achttal locaties langs de Waddenzee en het Eems-Dollard estuarium oppervlaktewater en zwevend stof bemonstert. De bemonstering is twee keer uitgevoerd, in oktober en eind november/begin december. Er zijn acht verschillende stofgroepen geanalyseerd in water en/of aan zwevend stof, namelijk:

1. polaire bestrijdingsmiddelen (water);
2. Metalen (water/zwevend stof);
3. Organotinverbindingen (zwevend stof);
4. PAKs (zwevend stof);
5. PCBs (zwevend stof);
6. HCB (zwevend stof);
7. Ftalaten (zwevend stof);
8. Gebromeerde vlamvertragers (zwevend stof).

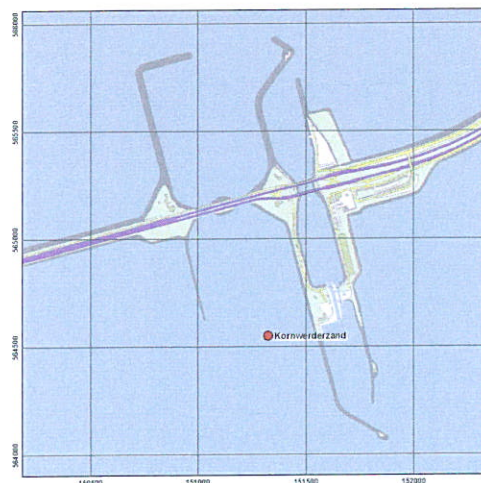
Om uitschieters te kunnen onderscheiden zijn samples, daar waar mogelijk, meervoudig geanalyseerd. Van de opgeloste stoffen uit stofgroep 1 en 2 zijn de samples enkel geanalyseerd. De zwevend stof samples van de stoffen uit stofgroepen 2, 3, en 4 zijn drievoudig geanalyseerd. De PCB en HCB samples in zwevend stof zijn enkel geanalyseerd wegens gebrek aan monstermateriaal. Ten slotte, de samples van de stoffen uit de groepen 7 en 8 zijn dubbelvoudig geanalyseerd.

De bemonsterde locaties betreffen spuisluisen en liggen in de watersystemen voor de KRW waterlichamen Waddenzee en Eems-Dollard, aan de zoete kant van de spuisluisen, tenzij anders aangegeven. De locaties inclusief bemonsteringsdata staan aangegeven in Tabel 2.1:

Tabel 2.1. Waterkwaliteit bemonsteringslocaties en bemonsteringsdata meetcampagne 2005

waterkwantiteit bemonsteringslocatie		bemonsteringsdata	
1.	In de haven van Den Helder	4-10-2005	21-11-2005
2.	Den Oever	6-10-2005	22-11-2005
3.	Kornwerderzand	7-10-2005	23-11-2005
4.	In de haven van Harlingen	10-10-2005	24-11-2005
5.	Lauwersmeer	12-10-2005	28-11-2005
6..	Eemskanaal (Delfzijl)	20-10-2005	1-12-2005
7.	Nieuwe Statenzijl	21-10-2005	-
8.	In de monding van de Eems bij Pogum (brak)	26-10-2005	-

In appendix A is een overzicht gegeven van de 8 bemonsteringslocaties. Twee detailvoorbeelden voor de spuisluisen van Kornwerderzand en Delfzijl zijn gegeven in Figuur 2.1 en Figuur 2.2.



Figuur 2.1 Waterkwaliteit bemonsteringslocatie Kornwerderzand.



Figuur 2.2 Waterkwaliteit bemonsteringslocatie monding Eemskanaal (Delfzijl).

Bijbehorende daggemiddelde spuidebieten voor 2005 zijn afkomstig van de waterschappen voor de locaties:

- vanuit Noord-Hollandskanaal via spuisluis in haven Den Helder;
- vanuit IJsselmeer via spuisluis Den Oever;
- vanuit IJsselmeer via spuisluis Kornwerderzand;
- vanuit Harixmakanaal via spuisluis in haven Harlingen;
- vanuit Lauwersmeer via spuisluisen Lauwersoog;
- vanuit Eemskanaal via spuisluisen in Zeehavenkanaal Delfzijl;
- vanuit Westerwoldse Aa via spuisluisen Nieuwe Statenzijl;
- vanuit Eems bij Pogum.

Detailkaarten van de waterkwaliteit-bemonsteringslocaties met uitzondering van de Eems bij Pogum staan in appendix A.

3 Vrachtberekeningsmethoden

In dit hoofdstuk wordt nader ingegaan op de definitie van een stofvracht en een samenvatting van de uit de literatuur gevonden vrachtberekeningsmethodieken.

3.1 Achtergrond

De algemene definitie van een stofvracht gedurende een bepaalde tijdsperiode (T) door een dwarsdoorsnede (A) is:

$$vracht = \int_0^T \int_0^A (uc) \cdot dAdt \quad (3.1)$$

met:

- t: tijd [s]
- T: tijdsperiode waarvoor de vracht wordt berekend [s]
- A: oppervlakte dwarsdoorsnede [m²]
- u(t): stroomsnelheid op tijdstip t [m/s]
- c(t): totaal stofconcentratie op tijdstip t [g/m³]

De aanname van homogeniteit over de dwarsdoorsnede zowel in concentratie als in de waterbeweging geeft dat de stroomsnelheid en de concentratie alleen functies zijn van de tijd. Formule (3.1) gaat dan over in (3.2):

$$vracht = \int_0^T Q(t) \cdot c(t) \cdot dt \quad (3.2)$$

met:

- Q(t): (spui)debiet [m³/s] op tijdstip t
- c(t): stofconcentratie op tijdstip t [g/m³]
- t: tijd [s]

Vanuit praktische en financiële randvoorwaarden worden c en Q in de praktijk discreet in de tijd en met een constant bemonsteringsinterval gemeten $t_1, t_1 + \Delta t, t_1 + 2 \cdot \Delta t, t_1 + 3 \cdot \Delta t, \dots$. In dat geval is de concentratie beschikbaar in de vorm van een tijdreeks $\{c_k\}_{k=1}^K$ waarbij $c_k := c(t_k)$ en $t_k := t_1 + (k-1) \cdot \Delta t$ het tijdstip van de k^e sample is. Voor de afvoer geldt op dezelfde manier dat deze beschikbaar is in de vorm van een tijdreeks $\{Q_k\}_{k=1}^K$. Op basis van deze tijdreeksen kan de jaarvracht dan geschat worden volgens:

$$vracht = \sum_{k=1}^K c_k \cdot Q_k \cdot \Delta t \quad (3.3)$$

Naarmate de tijdstap Δt kleiner is, zal de schatting van de jaarvracht volgens vergelijking (3) beter overeenstemmen met het exacte resultaat volgens het rechterlid van vergelijking (2). In fysische termen betekent dit dat de tijdstap Δt klein genoeg moet zijn om de tijdsvariaties in de concentraties en debieten met voldoende nauwkeurigheid weer te kunnen geven. Mathematisch (zoals in de signaaltheorie, en de theorie van tijdreeksen en stochastische processen) wordt dat vaak aangegeven met de terminologie dat Δt voldoende klein moet zijn ten opzichte van de *auto-korrelatietijd* in de tijd- of meetreeksen. Die auto-korrelatietijd geeft het geheugen in de tijdreeks weer, ofwel de tijdsduur dat samples van verschillende tijden nog afhankelijk van elkaar zijn. Voor concentraties en spuidebieten op het IJsselmeer wordt verwacht dat dit tijdsgeheugen in de reeksen op z'n minst enkele dagen of zelfs weken zal zijn. In dat geval zou $\Delta t = 1$ dag een redelijke sample dichtheid representeren. Met één sample per dag zou het totaal aantal samples in de berekening van de jaarvracht volgens vergelijking (3.3) dan $K=365$ of $K=366$ zijn.

3.2 Schattingsmethodieken

Vanwege praktische en financiële randvoorwaarden beschikt men in de praktijk doorgaans over daggemiddelde debieten en met uiteenlopende frequenties gemeten concentraties (maandelijks, wekelijks, etc). Om op basis van discrete metingen vrachten te schatten is een groot aantal numerieke procedures ontwikkeld (Klavers & de Vries, 1993). Elke schattingsmethode vult via een of ander pragmatisch recept de "gaten" in de concentratiereeks aan. Schattingsmethoden zijn onder te verdelen in inter- en extrapolatie technieken. Interpolatiemethoden stellen een momentane meting representatief voor een langer tijdsinterval dat, afhankelijk van bemonsteringsfrequentie, varieert van één dag tot maanden. De geldigheid van deze aanname hangt af van de tijdschaal van het bemonsterde proces, ofwel de frequentie van de fluctuaties in het 'vrachtsignaal'. Deze methoden verschillen in de mate waarin debietweging van de concentratie wordt toegepast. Het belang van debietweging neemt toe naarmate debiet en concentratie sterker gecorreleerd zijn. Voorbeelden zijn de directe methode (vergelijking (3.3)), de rechttoe-rechtaan-, de gewogen concentratie-, de lineaire interpolatie- en de gemiddelde afvoer per interval methode. Bij extrapolatiemethoden worden ontbrekende concentratie geschat met behulp van een vergelijking, die de relatie tussen debiet en concentratie weergeeft. De coëfficiënten van de vergelijking worden bepaald op basis van het (beperkte) aantal momentane metingen en de bijbehorende debieten. Als voorbeeld wordt de regressie methode genoemd.

De directe methode:

Vergelijking (3.3) in paragraaf 3.1 voor de vrachtbepaling wordt ook wel de directe methode genoemd. Bij de directe methode worden op die dagen waarop een concentratie beschikbaar is een dagvracht bepaald door deze concentraties te vermenigvuldigen met het bijbehorende gemiddelde dagdebiet. Hierbij worden dus alleen daggemiddelde debietgegevens gebruikt van de dagen waarop ook een concentratiemeting heeft plaatsgevonden. Deze methode geeft de beste benadering van de integraal in vergelijking (3.2). Bij ondersampling levert deze methode echter altijd een onderschatting.

Rechttoe-rechtaan methode:

Deze methode schat de jaarvracht als het product van een jaargemiddelde concentratie en jaargemiddeld debiet. Alle beschikbare debieten worden gebruikt, waarbij deze methode zich onderscheidt van de overige methoden doordat een tijdsgemiddelde concentratie wordt gebruikt. Debietweging ontbreekt volledig door het 'loskoppelen' van bij elkaar horende debiet- en concentratiemetingen.

De gewogen concentratie methode:

Het principe is gelijk aan dat van de directe methode (vergelijking 3.3), doch bij deze procedure wordt, zoals de naam al zegt, debietweging toegepast op de beschikbare concentratiegegevens. Elke concentratiewaarde krijgt hierbij een gewicht toegekend afhankelijk van de ratio tussen het debiet van de bewuste dag waarop de concentratie is gemeten en het daggemiddelde debiet over het gehele jaar.

De lineaire interpolatie methode:

Deze methode interpoleert de concentratie lineair tussen de dagen waarop bemonsterd is. Kenmerkend hierbij is het feit dat tussen de via lineaire interpolatie verkregen concentraties en de bijbehorende debieten geen relatie bestaat. Een eventuele relatie tussen debiet en concentratie in het oorspronkelijke signaal gaat bij het gebruik van deze methode verloren. De mate van verlies hangt af van het aantal gegenereerde concentratiewaarden ten opzichte van het aantal werkelijk gemeten concentraties.

De gemiddelde afvoer per interval methode:

Deze methode stelt een concentratiemeting representatief voor een interval, waarvoor een gemiddelde debiet bepaald wordt. In tegenstelling tot de directe methode, wordt aan een concentratiemeting niet het debiet voor diezelfde dag gekoppeld, maar het gemiddelde debiet over een aantal 'omringende' dagen. Stel dat een concentratie is gemeten op dagnummer D, de voorafgaande meting op dagnummer P en de volgende op dagnummer S. Het interval rond dag D begint dan op dagnummer $D-0.5(D-P)$ en eindigt op dagnummer $D+1/2(S-D)$. De grenzen van de intervallen liggen dus altijd halverwege twee opeenvolgende metingen. Ook deze methode gaat uit van de beschikbaarheid van dagelijkse debietgegevens.

De regressie methode:

Deze methode is gebaseerd op het 'modelleren' van de relatie tussen debiet en concentratie; bij het ontbreken van een dergelijke relatie is toepassing van de regressiemethode niet mogelijk. Onder modelleren wordt hier verstaan het opstellen van de vergelijking voor de relatie tussen Q en c. Dit gebeurt op basis van de n (=aantal concentratiemetingen) paren c_i en Q_i . Aan de hand van de zo verkregen vergelijking, wordt voor de dagen waarvoor geen concentratiemeting beschikbaar is, een waarde voor de concentratie berekend met behulp van het debiet voor die dag. De 'kwaliteit' van de beschrijving van de relatie hangt af van het aantal paren waarop de vergelijking is gebaseerd (hoe meer, hoe beter) en van de mate waarin Q en c aan elkaar zijn gerelateerd. Met andere woorden: de eenduidigheid van het verband tussen beide grootheden.

3.3 Betrouwbaarheid

Bij een schatting van een jaarvracht behoort ook een interval waarin de schatting zich zal bevinden met een bepaalde betrouwbaarheid. In het rapport “vrachtberekeningsmethodieken- een casestudy voor Maas en Rijn (Klavers en de Vries, 1993)” is onderzoek gedaan naar de betrouwbaarheid van de verschillende jaarvrachtberekeningsmethoden bij verschillende bemonsteringsfrequenties. In deze studie is het effect van verschillende invloedsfactoren (bemonsteringsfrequentie, berekeningsmethodiek, meetfouten) op de betrouwbaarheid van jaarvrachtschattingen in kaart gebracht. Hiertoe zijn bovengenoemde numerieke schattingsmethoden voor drie parameters (chloride, ammonium, en zwevend stof en twee watersystemen (Rijn en Maas) voor verschillende jaren onderzocht. Hierbij werd gebruik gemaakt van uitgebreide datasets die dagelijkse debiet- en concentratiegegevens bevatten. Op basis van deze uitgebreide gegevensset is een referentiejaarvracht berekend door sommatie van de 365 dagvrachten. Met behulp van een computerprogramma zijn bij verschillende bemonsteringsfrequenties de onzekerheden in debiet- en concentratiegegevens gesimuleerd. De gesimuleerde monitorings-activiteiten omvatten 6, 12, 24, 52, 100 en 200 equidistante metingen per jaar. Op deze wijze zijn verdelingen van schattingen van een jaarvracht verkregen. Elk van deze schattingen is op te vatten als een steekproefrekening uit alle mogelijke schattingen bij de betreffende bemonsteringsfrequentie. Het verschil tussen het gemiddelde van de schattingen en de referentievracht is aangehouden als maat voor de nauwkeurigheid. Een indicatie van de betrouwbaarheid/onzekerheid is afgeleid op basis van de spreiding van de schattingen. Merk op dat een dergelijke pragmatische aanpak enkel mogelijk is indien een dergelijke uitgebreide dataset bestaande uit 365 concentratie- en debietswaarden beschikbaar. Hiermee kan dan een referentievracht berekend kan worden waaraan de analyse opgehangen kan worden.

Belangrijkste conclusie uit dit rapport is dat zowel de bemonsteringsfrequentie als de berekeningmethode van grote invloed zijn op de nauwkeurigheid en betrouwbaarheid van schattingen van jaarvrachten. Deze invloed varieert voor verschillende parameters en watersystemen, afhankelijk van de variabiliteit van de vracht over een periode van een jaar. Variabiliteit van de vracht over een jaar wordt bepaald door:

- biologische, chemische en fysische processen die de concentratie van een parameter kunnen beïnvloeden (bijv. seizoensfluctuaties, adsorptie aan zwevend materiaal)
- de wijze waarop de stof in kwestie in het milieu terecht komt; een continue of periodieke bron (bijv. pesticiden versus chloride)
- afvoerregime van het watersysteem: gelijkmatig of gepiekt (Maas; sluizen)
- de (eventuele) relatie tussen het debiet en de concentratie.

Deze studie is meer een gevoeligheidsanalyse en levert geen eenduidige procedure voor de keuze van een berekeningsmethodiek bij een bepaalde sampling frequentie of bij een bepaald tijdsverloop van de concentratie.

4 Aanpak

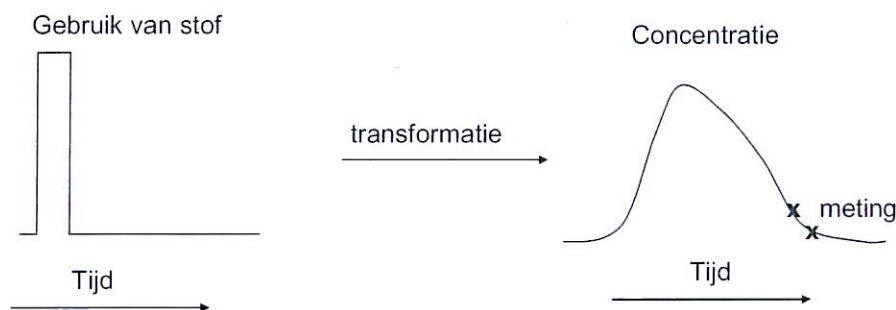
4.1 Inleiding

De beste benadering van een jaar/seizoensvracht wordt behaald door de dagvrachten te sommeren volgens vergelijking (3.3). Voor een jaarvracht zijn hiervoor echter 365 metingen voor zowel c als Q vereist. Bij ondersampling, wat in de praktijk vrijwel altijd het geval is, resulteert formule (3.3) altijd in een onderschatting van de jaarvracht. Daggemiddelde spuidebieten (op het Waddenzeegebied) zijn over het algemeen beschikbaar, echter de kostbare toxische stofmetingen zijn slechts beperkt beschikbaar (maximaal 2 keer per jaar, zie hoofdstuk 2) en dienen aangevuld te worden om te komen tot een schatting van de jaar/seizoensvracht. Dit aanvullen van de datagaps is de essentie van de formuleringen voor vrachtberekening zoals gepresenteerd in de vorige paragraaf. Elk van deze formuleringen vult op basis van een of ander pragmatisch recept deze onvolledige meetreeks aan. Het recept dat wordt gebruikt voor het uitbreiden van een onvolledige meetreeks naar een volledige tijdreeks (en/of een meer directe benadering van de jaarvracht) omvat impliciet bepaalde aannames over de (fysische en/of statistische) eigenschappen van de tijdreeks. Deze aannames worden vaak niet expliciet gemaakt. Voor een niet kritische lezer zal het niet duidelijk zijn wat die aannames feitelijk inhouden, en erger nog, of deze ook realistisch zijn. In deze zin is dan ook de conceptuele betekenis en het fysisch realisme van een zo afgeleide jaarvracht niet helder. Het kan zeker zinvol zijn dergelijke benaderingen te gebruiken omdat deze ook bij heel weinig meetdata een kwantitatieve schatting voor de jaarvracht opleveren. Er moet echter worden opgemerkt dat een dergelijke schatting in veel gevallen niet veel beter is dan een ruwe indicatie van de jaarvracht. In geval van een complete meetserie geven sommige (anders dan de directe methode) van de vrachtberekeningsmethoden zelfs een aantoonbaar foutief resultaat.

Bovendien is geen van de genoemde formuleringen voorzien van een recept waarmee de onzekerheid in de schatting voor de jaarvracht kwantitatief weergegeven kan worden. Op basis van steekproeven kan slechts een pragmatische indicatie van het betrouwbaarheidsinterval (de nauwkeurigheid) aangegeven worden (paragraaf 3.3). Bij een beperkt aantal metingen zal de onzekerheid in de schatting van de jaarvracht naar verwachting aanzienlijk zijn. Met het ontbreken van schattingen voor onzekerheden zijn de methoden onvoldoende onderbouwd om vragen te kunnen beantwoorden ten aanzien van hoe vaak en op welke tijden te meten opdat een zo nauwkeurig mogelijke schatting van de jaarvracht wordt verkregen, of omgekeerd een van te voren gewenste nauwkeurigheid wordt gehaald.

De onzekerheid in de schatting van een jaarvracht is direct gekoppeld aan de onzekerheid in het geschatte tijdsverloop van de concentratie over de vrachtberekeningsperiode. Oftewel, optimalisatie van het aanvullen van de datagaps zal beloond worden met een lagere onzekerheid. Het gebruik van een stof in de tijd en de manier waarop de stof in het watersysteem terechtkomt via verschillende emissieroutes zal uiteindelijk bepalend zijn voor de stofconcentratie nabij het afwateringspunt (spuisluizen). In feite wordt het ingangssignaal (het gebruik een stof over het jaar) middels transformatie omgezet naar een

concentratieprofiel nabij het afwateringspunt. Dit is schematisch weergegeven in onderstaande Figuur 4.1.



Figuur 4.1 Transformatie van gebruik van stof in de tijd naar concentratieprofiel bij afwateringspunt

De transformatie en hiermee het concentratieprofiel in de tijd bij de afwateringssluizen op de Waddenzee/Eems Dollard zal afhankelijk zijn van een aantal factoren:

Systeemeigenschappen

Het stroomgebied kan worden ingedeeld in verschillende deelstroomgebieden, drainage systeem, rivier systeem en estuarium. Elk van deze systemen kenmerkt zich met specifieke eigenschappen zoals verblijftijd, oppervlaktes, volumes en afwateringsdebieten die bepalend zijn voor het stoftransport.

Stofeigenschappen

Chemische stoffen in het water zijn onderhevig aan verschillende fysische en bio-chemische processen zoals:

- adsorptie aan opgelost organisch materiaal (DOC) en particulier organisch materiaal (POC);
- adsorptie aan anorganisch zwevend stof;
- vervluchtiging van de opgeloste fractie;
- netto sedimentatie van de aan POC geadsorbeerde verbindingen onderhevig netto sedimentatie;
- afbraak (omzettings) processen.

Als gevolg van deze processen zal een gedeelte van de stof in het watersysteem achterblijven (ofwel de retentie van een stof in een watersysteem) of via een andere route uit het systeem verdwijnen.

Toepassing van de stof in de tijd

De belasting van de stof aan het watersysteem is afhankelijk van het gebruik van verschillende gebruiksfuncties (huishoudelijk gebruik, industrie en de land-tuinbouw). Als gevolg van het gebruik van de stof komt de stof via verschillende emissieroutes (o.a. afspoeling, verwaaiing, uitspoeling en atmosferische depositie) in het watersysteem terecht. Afhankelijk van informatie omtrent het gebruik van de stof in een bepaald deelstroomgebied, worden in de volgende paragrafen een aantal methodieken beschreven om de vracht en bijbehorende betrouwbaarheid te schatten.

4.2 Rechttoe-rechtaan methode

Indien geen informatie bekend is over het gebruik van de stof over het jaar in de verschillende deelgebieden en slecht enkele metingen per jaar beschikbaar zijn, wordt voorgesteld de vracht te bepalen volgende de rechttoe-rechtaan methode (zie hoofdstuk 3). In feite komt dit neer op het gebruik van de directe methode, vergelijking 3.3, onder de aanname dat de concentratie constant is over het jaar. In hoeverre deze vracht berekening representatief is voor de jaarvracht is echter onzeker. Een globale indicatie van de betrouwbaarheid kan worden verkregen uit de spreiding van chloride en zwevende stof metingen (die in het algemeen met een veel hogere frequentie zijn gemeten). Deze stoffen kunnen als representanten worden beschouwd voor respectievelijk opgeloste en geadsorbeerde stoffen. Afhankelijk van de stoffeigenschappen kan per afwateringslocatie een globale indicatie van de betrouwbaarheid worden verkregen volgens:

$$\sigma_i \sim f(f_{dis} \cdot \sigma_{cl}, f_{poc} \cdot \sigma_{zs})$$

waar:

σ_i : relatieve spreiding van vracht van stof i

σ_{cl} : relatieve spreiding van chloride concentratie (afgeleid uit historische meetreeksen)

σ_{zs} : relatieve spreiding van (organisch) zwevende stof concentratie (afgeleid uit historische meetreeksen)

f_{dis} : fractie opgelost van stof i (af te leiden uit stoffeigenschappen)

f_{poc} : fractie geboden aan POC van stof i (af te leiden uit stoffeigenschappen)

De fractie opgelost en gebonden aan organisch materiaal zijn als volgt af te leiden. Organische microverontreinigingen zijn verdeeld over een opgeloste fractie, een aan opgelost organisch materiaal (DOC) geadsorbeerde fractie en een aan particulier organisch materiaal (POC) geadsorbeerde fractie, volgens:

$$C_{TOT} = C_{DIS} + C_{DOC} + C_{POC}$$

$$C_{DIS} = f_{DIS} \cdot C_{TOT}; C_{DOC} = f_{DOC} \cdot C_{TOT}; C_{POC} = f_{POC} \cdot C_{TOT}$$

waar:

C_{tot} : totale concentratie [mg/l]

C_{dis} : concentratie opgelost [mg/l]

C_{doc} : concentratie geadsorbeerd aan DOC [mg/l]

C_{poc} : concentratie geadsorbeerd aan POC [mg/l]

De fracties f_{dis} , f_{doc} en f_{poc} zijn als volgt gedefinieerd:

$$f_{DIS} = \frac{1}{1 + K_{DOC} \cdot DOC + K_{POC} \cdot POC}$$

$$f_{DOC} = \frac{K_{DOC} \cdot DOC}{1 + K_{DOC} \cdot DOC + K_{POC} \cdot POC}$$

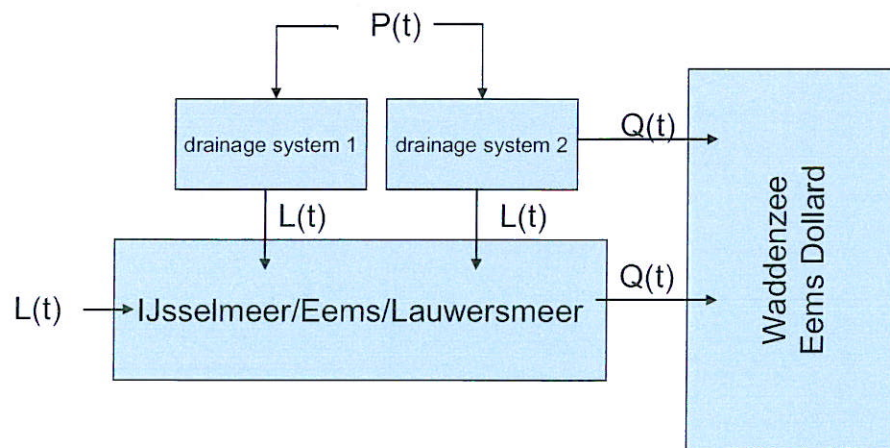
$$f_{POC} = \frac{K_{POC} \cdot POC}{1 + K_{DOC} \cdot DOC + K_{POC} \cdot POC}$$

met K_{poc} en K_{doc} als stofspecifieke partiticoëfficiënten.

Een dergelijke beschrijving kan eveneens worden opgesteld voor zware metalen.

4.3 Systeemmethode

Indien enige informatie bekend is over het gebruik van een stof over het jaar ($P(t)$) en emissiefactoren kan volgens deze methode een indicatie worden verkregen van het concentratieprofiel in de tijd bij de afwateringssluizen. Het watersysteem wordt hierbij opgedeeld in een aantal deelsystemen zoals in Figuur 4.2 is weergegeven.



Figuur 4.2 Schematische weergave van het watersysteem

Per emissieroute en per stof kan een emissiefactor worden geschat op basis van gebiedskennis en literatuurgegevens (e.g. RIVM, 1994 en WL, 1996). De uiteindelijke belasting van het oppervlaktewater vanuit het drainagesysteem wordt dan bepaald door de emissiefactor te vermenigvuldigen met de hoeveelheid gebruikte stof. Per stof en per drainagesysteem kan dit in onderstaande formulering worden weergegeven

$$L(t) \sim \sum_{i=1}^N P(t)_i \cdot e_{f,i}$$

waar:

$P(t)$: gebruik van stof in de tijd per gebruiksfunctie i

$e_{f,i}$: emissiefactor per gebruiksfunctie i

$L(t)$: stofvracht van het drainagesysteem naar het oppervlaktewater

Vervolgens kan uitgaande van een 1-dimensionaal systeem met een constant volume en stroomsnelheid de volgende stoftransportvergelijking worden opgesteld:

$$V \frac{\partial C}{\partial t} = -u \cdot V \frac{\partial C}{\partial x} - k_{ret} \cdot C + L(t)$$

waar:

V : volume van het riviersysteem (IJsselmeer/Eems/Lauwersmeer)

k_{ret} : retentiecoëfficiënt van een stof in het riviersysteem (deze factor bevat processcoëfficiënten zoals vervluchting, afbraak en netto sedimentatie)

Deze differentiaalvergelijking kan vervolgens voor elk afwateringssysteem (IJsselmeer, Eems, Lauwersmeer, Eemskanaal) wiskundig worden opgelost om een analytische beschrijving te verkrijgen van $C(t)$ ter plaatse van de afwatering via de spuisluizen. De betrouwbaarheid van een dergelijke beschouwing dient verder uitgediept te worden.

De jaar en/of seizoensvracht kan dan volgens de directe methode (hoofdstuk 3) worden geschat. Indicatie van de betrouwbaarheid kan volgens de in de vorige paragraaf beschreven rechttoe-rechtaan methode worden verkregen.

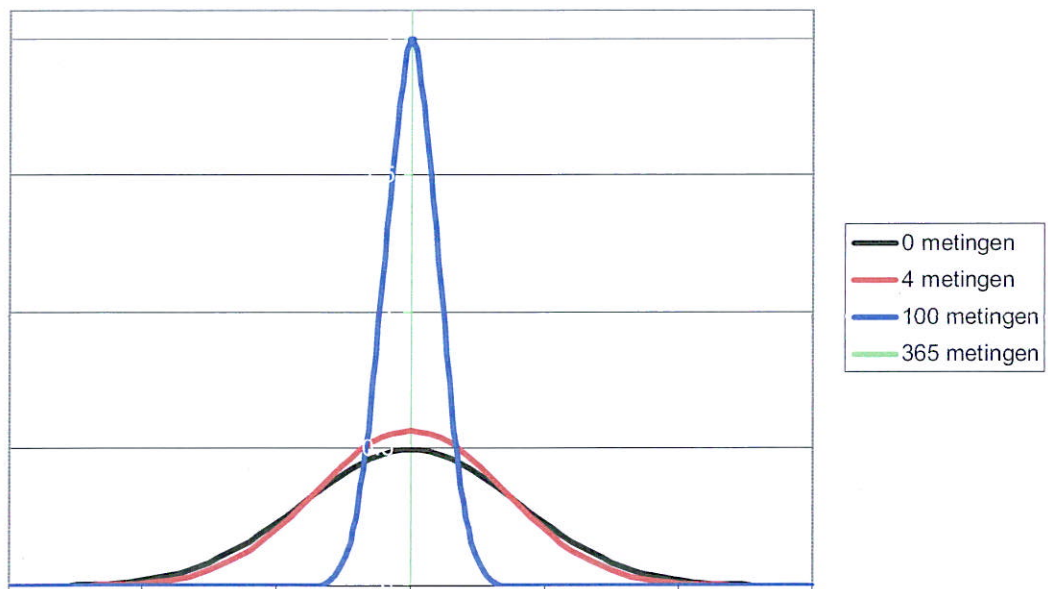
4.4 Stochastisch model

Indien men geïnteresseerd is in een statistisch onderbouwde kwantitatieve schatting van de jaarvracht en diens onzekerheid al dan niet op basis van metingen, dan biedt het opstellen van een statistisch (feitelijk stochastisch) model perspectief. Hierbij wordt vergelijking (3) als uitgangspunt genomen (ook bij weinig tot geen metingen). Het model brengt op onderbouwde manier de bijdragen van de ontbrekende metingen aan de jaarvracht (in statistische zin) in rekening. Het model neemt aan dat de daggemiddelde spuidebieten bekend zijn. Fundament van deze aanpak is dat de concentraties (b.v. de dagwaardes $c_1, c_2, c_3, \dots, c_{365}$) zullen worden opgevat als een stochastisch proces.

Het model dient gevoed te worden door statistische parameters van dit proces. Met andere woorden, het concentratieverloop in de tijd dient vastgelegd te worden in statistische eigenschappen. Afhankelijk van de hoeveelheid beschikbare informatie kunnen deze eigenschappen per tijdspanne opgegeven worden. Hiermee kan bijvoorbeeld seizoensafhankelijkheid ondervangen worden. Als eerste kental dient per gedefinieerde tijdspanne een gemiddelde opgegeven te worden. Het tweede vereiste kental is een maat voor de variabiliteit van de concentratie. Deze variabiliteit kan bijvoorbeeld worden weergegeven met een spreiding, en/of een onder- en bovengrens (rondom het gemiddelde) waartussen (in bijvoorbeeld 95% van de tijd) de concentratie zich zal bevinden. Het derde en laatste kental is de autocorrelatieperiode welke een maat is voor het geheugen van de concentratiereeks (zie hoofdstuk 3). Dit getal geeft aan op welke tijdschaal variaties plaatsvinden. In de praktijk zal het niet gemakkelijk zijn om de hierboven genoemde kentallen vast te stellen, en zullen mogelijk diverse aannames en/of schattingen gemaakt dienen te worden. Hierbij dienen alle mogelijke bronnen van informatie meegenomen te worden. Bij deze informatiebronnen moet gedacht worden aan gebieds-, systeem- en proceskennis, alsmede historische meetinformatie. De meetinformatie over het jaar dat een vracht geschat dient te worden wordt hier nog niet meegenomen. Ondanks een zekere subjectiviteit geven de kentallen dan alle a priori kennis (en/of aannames) weer, en vormen daarmee de best mogelijke kwantitatieve - en tegelijkertijd meest realistische - beschrijving van de eigenschappen van een concentratietijdreeks.

Deze kentallen worden gebruikt in (en/of vertaald naar) de wiskundige formulering van een stochastisch proces. Dat proces zal bestaan uit een tijdsafhankelijk gemiddelde, en een zogenaamde auto-covariantiefunctie voor de fluctuaties die rond zo'n gemiddelde kunnen optreden. Op basis van deze wiskundig/statistische modellering kunnen dan via vergelijking (3.3) de statistische eigenschappen van de jaarvracht berekend worden. Een belangrijk aspect hierin is dat niet alleen een schatting van die jaarvracht wordt verkregen maar tevens een maat voor de onzekerheid in die schatting. Die onzekerheid kan worden uitgedrukt met een spreiding, maar kan ook met een (bijvoorbeeld 95%) betrouwbaarheidsinterval weergegeven worden. De verkregen schattingen zijn *a priori* schattingen, dat wil zeggen de waarden die men van te voren verwacht, zonder dat er al gemeten is. Met andere woorden, bij de opbouw van het statistisch model zijn de beschikbare concentratiemetingen van het jaar waarvoor de vracht bepaald dient te worden niet meegenomen. Dit levert een schatting van de jaarvracht met maximaal betrouwbaarheidsinterval.

Concentratiemetingen voor de vrachtberekeningsperiode dienen op een statistisch onderbouwde manier in de procedure verwerkt worden. Wiskundig betekent dat bij de berekening van de jaarvracht niet de oorspronkelijke (beter gezegd: *a priori*) statistische eigenschappen van de reeks $\{c_1, c_2, c_3, \dots, c_{365}\}$ gebruikt moeten worden maar de eigenschappen van een conditioneel stochastisch proces. Conditioneel heeft betrekking op het feit dat de multi-variate eigenschappen van de reeks $\{c_1, c_2, c_3, \dots, c_{365}\}$ veranderen als men na het doen van metingen weet wat de realisatie van één of meerdere van de c_k ($1 \leq k \leq K$, $K = 365$) is geweest. Het effect van het toevoegen van metingen is dat zowel de schatting van de jaarvracht als diens onzekerheid veranderen. Toevoeging van metingen leidt altijd tot een reductie van de onzekerheid in de schatting van de jaarvracht. Bij één of een paar metingen zal deze reductie mogelijk niet zo heel veel zijn. Wordt er elke maand gemeten dan is die reductie wellicht wel significant. Zie Figuur 4.3 ter illustratie.



Figuur 4.3 Indicatie van mogelijk effect van metingen op onzekerheid jaarvracht schatting.

Samenvattend kan gesteld worden dat bovenstaand beschreven stochastisch model voor de stofconcentratie een kwantitatief raamwerk biedt voor het schatten van jaarvrachten, en diens onzekerheid. Met dit raamwerk kan het effect van metingen op enerzijds de schatting van jaarvracht en anderzijds de bijbehorende onzekerheid gekwantificeerd worden. Bovendien biedt de methode perspectief om inrichting van toekomstige meetcampagnes te optimaliseren. Dat wil zeggen, er kan bepaald worden hoeveel en wanneer te meten om te voldoen aan een van te voren vastgestelde marge van onzekerheid in een jaarvracht. Anderzijds, kan bepaald worden wanneer er gemeten dient te worden om de onzekerheid zoveel mogelijk te reduceren (spreiding in de tijd).

Bovendien kan worden aangetoond dat deze methode consistent is in de zin dat als alle concentraties $\{c_1, c_2, c_3, \dots, c_{365}\}$ gemeten worden er de exacte jaarvracht zal worden gevonden, en diens onzekerheid tot nul is gereduceerd.

Tenslotte wordt opgemerkt dat indien een jaarreeks $\{c_1, c_2, c_3, \dots, c_{365}\}$ beschreven kan worden als een Gaussisch stochastisch proces het mogelijk is om analytische uitdrukkingen af te leiden voor de jaarvrachten en diens onzekerheid. Gemeten concentraties kenmerken zich echter door scheve verdelingen en daarom zal aan Gaussische eigenschappen niet helemaal voldaan zijn. In dat geval moet worden nagegaan hoe deze reeksen dan wel te beschrijven, en wat de effecten op de jaarvrachten zijn. Mogelijk moet dan van numerieke methoden en/of synthetische tijdreeksen gebruik worden gemaakt. Dat moet nog in nader detail onderzocht worden.

5 Samenvatting en Conclusies

Het bepalen stofvrachten op basis van slechts enkele metingen is niet triviaal. De exacte vracht van een stof is gedefinieerd door een continue debietregistratie te vermenigvuldigen met een continue stofconcentratie-registratie. Dit is praktisch gezien niet mogelijk, waardoor slechts een schatting van de stofvracht kan worden bepaald. Idealiter zouden voor een nauwkeurige schatting van de jaar/seizoensvracht de debieten- en stofconcentratiemetingen met een frequentie van circa 1 dag beschikbaar moeten zijn. De beste benadering voor een jaarvracht wordt behaald door de dagvrachten te sommeren, hiervoor zijn dus 365 debiet- en concentratiemetingen noodzakelijk. De debietmetingen bij de sluizen zijn over het algemeen met een dagfrequentie bepaald, echter de kostbare toxische stoffen metingen hebben een veel lagere meetdichtheid (slechts per afwateringslocatie enkele metingen in 2005). Om op basis van de metingen toch jaar/seizoensvrachten te kunnen bepalen zijn er in de literatuur diverse schattingsmethoden opgesteld die de “gaten” in het concentratieverloop middels interpolatie of extrapolatietechnieken opvullen. Het recept om voor het uitbreiden van een onvolledige meetreeks naar een volledige tijdsreeks omvat impliciet aannames over de fysische eigenschappen van het concentratieverloop.

In een eerdere studie is de betrouwbaarheid van de berekeningsmethodieken uitgebreid onderzocht. De belangrijkste conclusie hieruit is dat zowel de bemonsteringsfrequentie en schattingsmethode van grote invloed zijn op de nauwkeurigheid en betrouwbaarheid van de schattingen van de jaarvracht. Er dient hierbij vermeld te worden dat geen van de schattingsmethoden kwantitatief de mathematische onzekerheid in de schatting van de jaarvracht kan weergeven en dat slechts een pragmatische indicatie van het betrouwbaarheidsinterval kan worden aangegeven. De onzekerheid in de schatting van een jaar/seizoensvracht is direct gekoppeld aan de onzekerheid in het geschatte tijdsverloop van de concentratie over de vrachtberekeningsperiode. Ofwel, optimalisatie van het aanvullen van de “gaten” in de concentratietijdreeks zal beloond worden met een lagere onzekerheid.

In deze deelnotitie is een voorstel gedaan om op grond van stoffeigenschappen, systeemkennis en het gebruik van de stof, het concentratieverloop te kunnen afleiden bij de afwateringspunten. Vervolgens zijn drie voorstellen geschetst om de jaar/seizoensvracht te schatten op basis van een pragmatische methode waarmee een globale indicatie kan worden gegeven van de vracht en onzekerheid en een meer generieke stochastische methode, waarin de stoffeigenschappen, systeemkennis en alle historische meetinformatie worden vertaald naar een aantal statische kentallen. Het voordeel van de laatste methode is dat het een kwantitatief raamwerk biedt voor het schatten van de vrachten en diens onzekerheid. In het verlengde biedt de methode uitgesproken perspectieven om vast te stellen hoeveel en wanneer er gemeten moet worden om te voldoen aan een van te voren vastgestelde marge van onzekerheid in de jaar/seizoensvracht. Vooralsnog is het echter onzeker of de historische gegevens voldoende zijn om de statistische kentallen te kwantificeren.

De methoden zijn nog niet in detail uitgewerkt en dienen voornamelijk ter discussie om met de opdrachtgever te bezien welke aanpak in het vervolg van deze studie het meest passend is gegeven de randvoorwaarden van dit project.

Literatuur

Klavers & de Vries, 1993: Vrachtberekeningsmethoden, een Casestudy voor Maas en Rijn, RIZA en Dienst Getijdewateren, GWWS-93.111x/RIZA-93.021x.

RIVM, 1994: Uniform System for the Evaluation of Substances (USES), version 1.0. Distribution No. 11144/150 (eds. D.T. Jager and C.J.M. Visser) Bilthoven, The Netherlands

WL| Delft Hydraulics, 1996: Screening tool for Assessment of Risks as result of emissions of toxic substances into the North Sea (Scremotox), Report nr. T1492

Wulffraat et al. 1993: De belasting van de Noordzee met verontreinigende stoffen, 1980-1990. Rapport DGW-93.037, K.J. Wulffraat, Th. Smit, H. Grokamp, A. de Vries, Rijkswaterstaat, 1993.

A Bemonsteringslocaties waterkwaliteit



Overzicht meetlocaties Eems-Dollard meetcampagne aanvullend onderzoek 2005



Overzicht meetlocaties Waddenzee meetcampagne aanvullend onderzoek 2005.

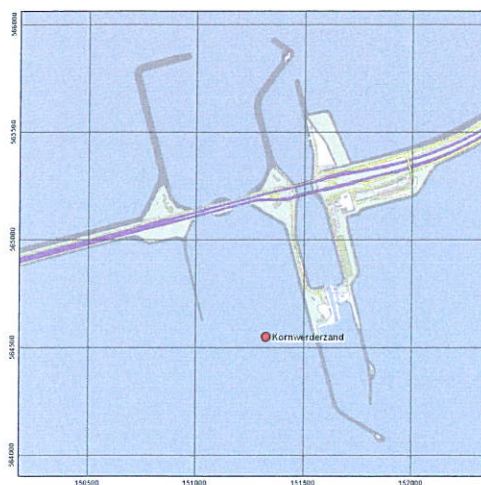
Detailkaarten:



1. In de haven van Den Helder



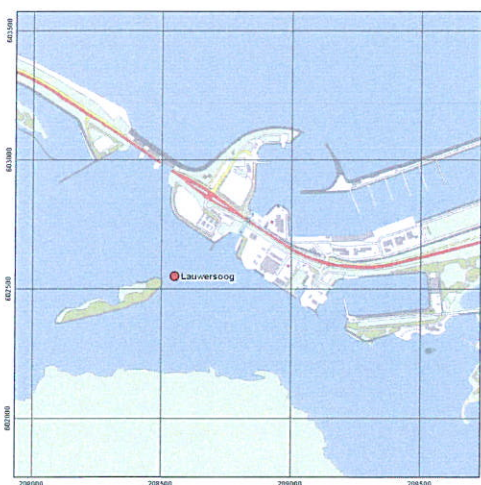
2. Den Oever



3. Kornwerderzand



4. In de haven van Harlingen



5. Lauwersmeer



6. Eemskanaal (Delfzijl)



7. Nieuwe Statenzijl



WL | Delft Hydraulics

Rotterdamseweg 185
postbus 177
2600 MH Delft
telefoon 015 285 85 85
telefax 015 285 85 82
e-mail info@wldelft.nl
internet www.wldelft.nl

Rotterdamseweg 185
p.o. box 177
2600 MH Delft
The Netherlands
telephone +31 15 285 85 85
telefax +31 15 285 85 82
e-mail info@wldelft.nl
internet www.wldelft.nl

