

waterloopkundig laboratorium
delft hydraulics laboratory

waterkwaliteitsmodel Rijn

MODQUAL;
een ééndimensionaal steady state
waterkwaliteitsmodel voor rivierstelsels

verslag onderzoek

R 1056-IV/R 1463-I/S 321-IV

juli 1981

waterkwaliteitsmodel Rijn

MODQUAL;
een ééndimensionaal steady state
waterkwaliteitsmodel voor rivierstelsels

verslag onderzoek

R 1056-IV / R 1463-I / S 321-IV

juli 1981

Leidraad bij het rapport R1056-IV/R1463-I/S321-IV MODQUAL

Deze leidraad heeft tot doel de voorzitter en leden van de stuurgroep enigszins wegwijs te maken in de opbouw van het rapport. Afhankelijk van de gewenste mate van detail en de invalshoek van waaruit men deze problematiek beziet, wordt hiermee getracht een gerichter studie van het rapport mogelijk te maken.

De volgende gedeelten van het rapport kunnen in dit verband worden onderscheiden:

1. Het algemeen samenvattend gedeelte: dit omvat de hoofdstukken 1, 2, 3 en 8, alsmede bijlage I en beslaat ca. 20% van het rapport.
2. Het gedeelte waarin nader wordt ingegaan op de wiskundige representatie van processen, de gebruikte oplossingstechniek en enkele nauwkeurigheidsbeschouwingen. Dit gedeelte omvat hoofdstuk 4 en beslaat ook ca. 20% van het rapport.
3. Het gedeelte waarin de informatie wordt gegeven welke noodzakelijk is om het programma te implementeren, te bedienen en toe te passen. Dit gedeelte omvat het resterende deel en beslaat ca. 60% van het gehele rapport.

INHOUD

LIJST VAN FIGUREN

	blz.
<u>1</u> <u>Inleiding</u>	1
1.1 De projecten "Waterkwaliteitsmodel Rijn" en "Waterkwaliteitsmodel Maas".....	1
1.2 MODQUAL, een ééndimensionaal steady-state waterkwaliteitsmodel voor rivierstelsels.....	4
<u>2</u> <u>Samenvatting en konklusies</u>	7
<u>3</u> <u>Algemene modelformulering</u>	10
3.1 Toestandsvariabelen en processen.....	10
3.2 Geometrie.....	12
3.3 Hydrologie.....	14
3.4 Tijdschaal.....	14
<u>4</u> <u>Wiskundige formulering</u>	16
4.1 Transportvergelijking.....	16
4.1.1 Balansrepresentatie.....	16
4.1.2 Differentiaalvergelijking.....	17
4.2 Hydraulische karakteristieken.....	18
4.3 Reactie-kinetiek.....	22
4.3.1 Konservatieve en niet-konservatieve stoffen.....	22
4.3.2 Koolstof.....	23
4.3.3 Fosfor.....	25
4.3.4 Stikstof.....	26
4.3.5 Algen en detritus.....	28
4.3.6 Zuurstof.....	32
4.4 Oplossingstechnieken.....	34
4.4.1 Het lineaire stelsel.....	34
4.4.2 Niet-lineaire componenten.....	36

INHOUD (vervolg)

blz.

5	<u>Modelinvoer en -resultaat</u>	38
5.1	Benodigde invoer.....	38
5.1.1	Keuze van opties.....	38
5.1.2	Uitvoerdefinitie en probleemdimensie.....	39
5.1.3	Trajektindeling.....	40
5.1.4	Uitvoer bij meetstations en elementindeling.....	42
5.1.5	Hydraulische, zuurstof- en koolstofprocesgegevens.....	43
5.1.6	Overige procesparameters.....	43
5.1.7	Beginvoorwaarden.....	45
5.1.8	Diffuse toestroming.....	46
5.1.9	Stuwen en splitsingen.....	47
5.1.10	Bovenstroomse uiteinden.....	48
5.1.11	Lozingen en onttrekkingen.....	48
5.2	Modeluitvoer.....	48
6	<u>Computerimplementatie</u>	50
6.1	Programma-eigenschappen.....	50
6.2	Modulaire opbouw.....	50
6.3	Beschrijving van de modules.....	52
7	<u>Kalibratie, verifikatie en toepassingen</u>	55
7.1	Kalibratie en verifikatie.....	56
7.1.1	Geometrische indeling.....	56
7.1.2	Steady-state perioden.....	57
7.1.3	Lozingen en processen.....	58
8	<u>Toepassing van MODQUAL in Nederland</u>	62
8.1	Toepassing van MODQUAL op de Rijn.....	62
8.2	Toepassing van het model MODQUAL op de Maas.....	63

LITERATUUR

BIJLAGEN

FIGUREN

Lijst van figuren

1. Integrale modelstructuur MODQUAL
2. Rekenelement, traject en balanst termen MODQUAL
3. Schematische voorstelling van dispersie in rivieren ten gevolge van snelheidsverschillen
4. Algengroei, afhankelijkheid van licht
5. Enige mogelijke netwerkkonfiguraties in MODQUAL
6. Modulaire structuur MODQUAL
7. Fasen in het modelleringsproces
8. Zuurstof in de Rijn te Lobith
9. BZV in de Rijn te Lobith
10. Ammonium in de Rijn te Lobith
11. Totaal fosfor in de Rijn te Lobith
12. Langsprofiel van organisch stikstof in de Maas in 1979
13. Langsprofiel van ammonium in de Maas in 1979
14. Langsprofiel van nitriet+nitraat in de Maas in 1979

1 Inleiding

1.1 De projecten "Waterkwaliteitsmodel Rijn" en "Waterkwaliteitsmodel Maas"

In 1976 is een samenwerkingsproject met betrekking tot de modelmatige benadering van de waterkwaliteit van de Rijn gestart tussen het Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater (RIZA), Direktie 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 opgelegd 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 een modelmatige benadering 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 Deltawateren).

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.

In 1978 werd een aanvang gemaakt met het project Waterkwaliteitsmodel Maas, opgedragen door RWS Direktie Limburg (LIM) en Rijksinstituut voor Zuivering van Afvalwater (RIZA).

De aanleiding tot dit projekt is vooral gelegen in de huidige kwaliteit van het Maaswater, het belang van de Maas voor het vervullen van een aantal maatschappelijke funkties en de ontwikkelingen in de beleid- en beheersfeer met betrekking tot de waterkwaliteit in het (Nederlandse) stroomgebied van de Maas.

Evenals voor de Rijn werd ook voor de Maas op basis van een probleemevaluatie, in overleg met LIM en RIZA besloten tot een modelmatige benadering van de waterkwaliteit van de Maas. Als hoogste prioriteit gold de zuurstof- en nutriëntenhuishouding. Dit werd vooral gezien in het licht van de eutrofiëringsproblematiek, welke zich vooral manifesteert bij de opslag van Maaswater ten behoeve van de drink- en industriewatervoorziening, het feit dat de min of meer stagnante (toekomstige) deltawateren voor een deel gevoed worden door de Maas, en vanwege het semi-stagnante karakter van de Maas zelf tijdens droge perioden.

Met het onderzoek wordt beoogd een mathematisch model te ontwikkelen dat in staat is de zuurstof-, stikstof-, fosfaat- en algenhuishouding van de Maas te beschrijven als funktie van hydrologische gegevens, lozingsgegevens en temperatuur. Het onderzoek is een samenwerkingsprojekt tussen LIM, RIZA, W&W en WL.

Naast de mogelijkheid om met de modellen voorspellingen te kunnen doen met betrekking tot de, na voltooiing van de geplande saneringsmaatregelen, te verwachten zuurstof- en nutriënniveaus in Rijn en Maas, mag worden verwacht dat het onderzoek het inzicht zal vergroten in de herkomst van belastingen op beide rivieren en de invloed van processen.

Op deze wijze ontstaat tevens de mogelijkheid alternatieven 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 projektgroepen "Waterkwaliteitsmodel Rijn" en "Waterkwaliteitsmodel Maas".

De samenstelling van zowel de stuurgroep als de projektgroepen is opgenomen in bijlage 1.

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

* R 1056-I/S 321-I

"Modellering Rijnwaterkwaliteit, probleemanalyse"

april 1977

* R 1056-II/S 321-II

"Modellering Rijnwaterkwaliteit, processen zuurstofmodellering"

april 1977

* R 1056-III/S 321-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

* R 1056-V/S 321-V

"Diffuse bronnen, aard en omvang van de diffuse belasting met nutriënten in het stroomgebied van de Rijn"

juli 1981

* R 1056-VI

"Data-rapport, gegevens verzameling en analyse ten behoeve van de modellering van de zuurstof en nutriëntenhuishouding"

juli 1981

* R 1056-VII/S 321-VI

"Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Rijn"

juli 1981

* R 1056-VIII

"Simulaties met het Waterkwaliteitsmodel Rijn, zuurstof-, stikstof- en fosfaathuishouding"

augustus 1981

De rapportage van het project Waterkwaliteitsmodel Maas, met betrekking tot de modellering van zuurstof en nutriënten, omvat de navolgende rapporten:

* R 1463-II

"Data-rapport, gegevens verzameling en analyse ten behoeve van de modellering van het Nederlandse deel van de Maas"

* R 1463-III/S 321-VII

"Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Maas. Kalibraties en Verifikaties"

* R 1463-IV

"Toepassing van het waterkwaliteitsmodel MODQUAL op de Maas. Simulering van scenario's"

Onderhavig rapport R 1056-IV/R 1463-I/S 321-IV:

"MODQUAL, een ééndimensionaal steady state waterkwaliteitsmodel voor rivierstelstels" betreft een gezamenlijke rapportering van de projecten Waterkwaliteitsmodellen Rijn en Maas en wordt in paragraaf 1.2 nader ingeleid.

1.2 MODQUAL, een ééndimensionaal steady-state waterkwaliteitsmodel voor rivierstelstels

In de probleemanalyserende fase van het project "Waterkwaliteitsmodel Rijn" is een inventarisatie uitgevoerd met betrekking tot de processen welke bij zuurstofmodellering een rol spelen en is een aantal zuurstofmodellen nader geëvalueerd (rapporten R 1056/S 321-I-II-III). Hierbij is reeds naar voren gekomen dat het aanbeveling verdient gebruik te maken van een bestaand waterkwaliteitsmodel dat op eenvoudige wijze geschikt gemaakt kan worden voor toepassing op de Rijn.

De eisen waaraan een dergelijk model zou moeten voldoen hadden betrekking op

- de te modelleren geometrie

- de te modelleren variabelen en processen

- de flexibiliteit van de invoer van lozingen, hydraulika, procesparameters e.d.
- de mogelijkheid van het aanbrengen van wijzigingen in de modelstructuur
- de rekentijd
- de uitvoer
- de dokumentatie
- de implementatie.

Aan de hand van deze punten werden de in de Verenigde Staten veel toegepaste modellen QUAL-II van Water Resources Engineers Inc. en Explore-I en Pionier-I van Batelle Pacific Northwest Labs. met elkaar vergeleken.

Uiteindelijk is de keuze gevallen op QUAL-II. [4, 8, 18]

Dit model is in 1972 ontwikkeld door Water Resources Engineers Incorporated voor de US Environmental Protection Agency [9]. In 1976 is het model sterk uitgebreid ten behoeve van de Southeast Michigan Council of Governments (SEMCOG), resulterend in de versie van juli 1977, welke in begin 1978 bij het Waterloopkundig Laboratorium is geïmplementeerd [13].

Op deze wijze beschikte het project "Waterkwaliteitsmodel Rijn" snel over een goed, operationeel, model. Dit kon als basis dienen voor de modellering van de waterkwaliteit van de Rijn. Daartoe werd het model achtereenvolgens uitgebreid met een COD-module, de modellering van organisch en partikulair stikstof en partikulair fosfor.

Wanneer medio 1979 de modellering van de Maas aanvangt ontstaan aanvullende wensen met betrekking tot de geometrie, beluchting bij stuwen en de modellering van de algengroei.

De modificaties die in het kader van beide projecten aangebracht zijn, zijn zo talrijk en ingrijpend geweest, dat alleen in de opbouw van het computerprogramma de oorspronkelijke versie nog te herkennen valt. De nu ontstane versie wordt verder MODified QUAL (MODQUAL) genoemd.

Ook in de Verenigde Staten hebben de ontwikkelingen niet stil gestaan. De wijzigingen die NCASI aangebracht heeft [10] en de EPA veranderingen betreffen punten waarop in MODQUAL ook is voorzien. Voor zover ons bekend is MODQUAL echter de enige versie die willekeurige netwerken en stuwen aan kan.

Hoewel het model nog voortdurend op details wijzigingen ondergaat, betreffen deze steeds meer het gebruikersgerief, de overzichtelijkheid van de programma-tuur en de reductie van rekentijd.

In dit stadium is het derhalve goed mogelijk tot een samenvattende rapportage te komen zonder dat het gevaar aanwezig is dat het rapport snel veroudert. Geheel nieuwe ontwikkelingen, zoals de konstruktie van meer dynamische versies

zullen in aparte modellen naast MODQUAL resulteren.

Het onderzoek is verricht door ir. J.A. van Pagee en ir. L. Postma en is gerapporteerd door ir L. Postma.

2 Samenvatting en konklusies

Een rivier vervult een groot aantal funkties. Genoemd kunnen worden die van scheepvaartweg, bron van koel- en proceswater, bron van drinkwater en agrarische waterbehoefte en transportweg voor afvalwater.

Daar waar de ene gebruiksfunctie de andere geheel of gedeeltelijk belemmert is een onderlinge afweging van oorzaken en gevolgen, alswel een voorspelling van het effect van maatregelen, van groot belang.

Wat betreft de waterkwantiteitsaspecten zelf, zijn hydraulische modellen, zowel op schaal als in de vorm van wiskundige modellen, een middel tot analyse en voorspelling. Wanneer de waterkwaliteit in het geding is beperkt zich de bruikbaarheid van schaalmodellen al gauw tot de transportprocessen. Te noemen zijn de zoutindringing, de verspreiding van verontreinigingen of de verspreiding van thermische belasting. Voor bio-chemische waterkwaliteitsaspecten staan vrijwel uitsluitend wiskundige modellen ter beschikking [16]. In principe kennen deze modellen drie dimensies en een gedeelte dat het transport van stoffen beschrijft enerzijds en een deel dat de reaktiekinetiek van de stoffen beschrijft anderzijds.

Voor rivieren geldt een geprononceerd snelheidsveld in stroomafwaartse richting. Wanneer één der dimensies langs de lengte-as van de rivier wordt gedacht vallen de snelheden in de overige richtingen al gauw in het niet bij die in de lengterichting.

Middelings over de dwarsdoorsnede van de snelheidskomponenten laat een gemiddelde snelheid in de langsricting ontstaan en de heterogeniteit over de dwarsdoorsnede vindt dan zijn weerslag in een mengterm, deze term is doorgaans veel groter dan de turbulente menging en de moleculaire diffusie. De menging die voortvloeit uit het heterogene snelheidsveld over de dwarsdoorsnede wordt doorgaans gelumped in een dispersieterm. Deze benadering levert voor niet te grote concentratiegradiënten een bevredigend resultaat.

Om deze reden volstaat doorgaans een één dimensionaal model voor de beschrijving van de waterkwaliteit. Men moet zich echter bewust zijn van de noodzaak metingen te beschouwen die zich zover van een lozing of zijrivier bevinden dat aan de vooronderstelling van homogeniteit over de dwarsdoorsnede is voldaan.

Hoewel het aantal funktionerende automatische monitors toeneemt, is voor een groot aantal lokaties en een groot aantal waterkwaliteitsvariabelen toch het wekelijks of twee-wekelijks steekmonster de enige bron van informatie. Omdat doorgaans niet looptijd-afhankelijk bemonsterd wordt maar op geselecteerde dagen, zal vaak een monster genomen worden uit een waterpakket met verschil-

lende voorgeschiedenis. Dit leidt tot de behoefte om over een bepaalde periode een soort "gemiddelde voorgeschiedenis" aan te nemen die voor ieder waterpakket van die periode zou gelden. Deze gemiddelde toestand duidt men dan aan met de term "steady-state".

Een modellering van een "steady-state" situatie met betrekking tot debiet en temperatuur sluit een tijdsafhankelijke, dynamische modellering van de dagelijkse fluktuaties in algengroei en zuurstof of van een verspreiding van een kalamiteuze lozing niet uit.

De tegenpool van een steady-state benadering wordt gevormd door het dynamische model. Hiermee wordt beoogd op iedere plaats van het rivierstelsel op ieder tijdstip de gehalten te modelleren. Kalibratie en verificatie eisen dan een aanzienlijk grotere gegevensverzameling, die wellicht met eerder genoemde monitors geproduceerd kan worden. Tussenvormen kunnen bestaan uit het aaneenschakelen van steady-state simulaties of door het uittrekken van de dynamische simulatie tot enkele op zich zelf staande waterpakketjes die los van elkaar stroomafwaarts gevolgd worden.

Ten behoeve van de projecten "Waterkwaliteitsmodel Rijn" en "Waterkwaliteitsmodel Maas" is een ééndimensionaal steady-state model MODQUAL geïmplementeerd en verder ontwikkeld. Het model is een sterk gemodificeerde versie van het in de Verenigde Staten ontwikkelde model Qual II. Het model lost de transportvergelijking, met advectie en dispersietermen, op door een matrix inversie. Wanneer bij konstant debiet een variabele lozingskomponent of dagelijkse zuurstoffluktuaties een tijdsafhankelijke oplossing berekend wordt gebeurt dit met de eindige differentiemethode met een volledig impliciet schema.

Het model is in staat stoffen met een willekeurige kinetiek te modelleren. Voor sommige niet-lineariteiten wordt de oplossing direkt verkregen. Voor de overige gevallen wordt de oplossing door iteratie bereikt.

De kinetiek van nutriënten, algen, zuurstofverbruik, zuurstof en bacteriën is in het model voorgeprogrammeerd.

Het model is overzichtelijk van invoer en uitvoer en kent een modulaire opbouw zodat wijzigingen eenvoudig aan te brengen zijn. Van de toepassing op Rijn en Maas worden enige voorbeelden gegeven.

Het model wordt als basis gebruikt voor de verdere ontwikkelingen naar tijdsafhankelijke simulatie op langere tijdschaal. Voor de Rijn in de vorm van een aaneenschakeling van maandelijks steady-state perioden, voor de Maas in de vorm van het volgen van geïsoleerde pakketten water stroomafwaarts.

Voor de steady-state simulatie van de waterkwaliteit is het model MODQUAL bijzonder geschikt. Voor dat doel zal het model in zijn huidige vorm gehand-

haafd blijven naast eventuele toekomstige ontwikkelingen op het gebied van de modellering van de waterkwaliteit in rivieren. De te verwachten modifikaties in de toekomst zullen gradueel van karakter zijn en waar deze wat ingrijpender zijn, vooral de implementatie van nieuwe stoffen behelzen.

3 Algemene modelformulering

In dit hoofdstuk zullen de mogelijkheden en beperkingen van het model MODQUAL worden belicht. Onderscheid wordt gemaakt in de in het model opgenomen toestandsvariabelen en processen, de geometrie, de hydrologie en de tijdschaal waarop het model toegepast kan worden.

3.1 Toestandsvariabelen en processen

MODQUAL is een waterkwaliteitsmodel. Dit houdt in dat gehalten van stoffen die de waterkwaliteit beïnvloeden met het model gesimuleerd kunnen worden. MODQUAL is zo gestructureerd dat het eenvoudig mogelijk is stoffen toe te voegen of weg te laten en de processen waaraan stoffen onderhevig zijn te wijzigen. In die zin, moet de nu opgenomen stoffenverzameling gezien worden als een groep die al in het model voorgeprogrammeerd is. Voor andere toepassingen is het zonder problemen mogelijk stoffen aan de voorgeprogrammeerde groep toe te voegen. Tabel 1 waarin een overzicht gegeven wordt van de nu opgenomen stoffen moet dus niet limitatief worden beschouwd.

stof	optienummer
zuurstof	7
biochemisch zuurstofverbruik (BZV)	3/12
chemisch zuurstofverbruik (CZV)	10
temperatuur	2
algen	4
detritus	11
organisch en partikulair stikstof	6
ammonium	6
nitriet	6
nitraat	6
ortho-fosfaat	5
partikulair fosfor	5
coliforme bacteriën	8
3 conserverende stoffen	1
20 stoffen met willekeurige kinetiek	9

Tabel 1 In MODQUAL voorgeprogrammeerde stoffen met hun in het model gebruikte optienummer.

De konservatieve en niet-konservatieve stoffen stellen de gebruiker in staat, afhankelijk van de specifieke eisen van de studie, modificaties en uitbreidingen aan te brengen, naast de expliciet voorgeprogrammeerde stoffen.

Ten behoeve van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn" wordt op deze wijze het aantal inwonerekwivalenten gevolgd en het CZV gemodelleerd, op een manier dat daaruit een van de zuiveringsgraad afhankelijke afbraaksnelheid voor BZV ontstaat.

Ten behoeve van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Maas" worden enkele modules voor niet-konservatieve stoffen gebruikt om bijzondere lozingen apart te modelleren. Hoewel de toegepaste kinetiek gelijk is aan die van voorgeprogrammeerde stoffen is het op deze manier mogelijk naar aard en herkomst van het materiaal andere afbraak- of sedimentatiesnelheden te hanteren. De gehalten, van uit afzonderlijke lozingen afkomstig materiaal, worden dan uiteindelijk tot één totaal opgeteld.

In tabel 2 wordt een overzicht gegeven van de nu in het model opgenomen processen. Bij temperatuur is "pro memori" opgenomen omdat temperatuurmodellering met het model tot nu toe nog niet heeft plaatsgehad en de in het oude QUAL-II programma aanwezige routines hiertoe kunnen in MODQUAL toegepast worden maar zijn nog niet uitgetest. Tot nu toe is met gemeten temperaturen in de rivier gewerkt, waar een temperatuureffekt in het geding was.

Figuur 1 geeft een overzicht van de integrale modelstructuur van de onderling samenhangende stoffen.

stof	processen
zuurstof	beluchting aan het oppervlak*, beluchting bij stuwen*, zuurstofgebruik van het sediment*, biochemisch zuurstofgebruikt*, zuurstofgebruik door nitrifikatie*, produktie en respiratie door algen*
BZV	afbraak* en sedimentatie
CZV	sedimentatie
temperatuur	p.m.
algen	groei*, respiratie*, afsterving*, zelfschaduwning, sedimentatie
detritus	afbraak* en sedimentatie
org. + part. N	afbraak* en sedimentatie
ammonium, nitriet, nitraat	nitrifikatie* en denitrifikatie*, opname door en vrijkomen uit algen*, vrijkomen ammonium uit de bodem*
ortho-fosfaat	vrijkomen uit de bodem*, adsorptie opname door en vrijkomen uit algen*
partikulair-fosfor	sedimentatie
koliforme bacteriën	afbraak*
konserveerbare stoffen	geen
niet-konserveerbare stoffen	binnen zekere grenzen willekeurig

Tabel 2 In MODQUAL aanwezige processen.

Met * gemerkte processen zijn temperatuurafhankelijk opgenomen

3.2 Geometrie

MODQUAL is in staat een willekeurig netwerk van één dimensionale trajekten te modelleren. Figuur 5 toont twee van de mogelijke configuraties. In het netwerk mogen echter geen kringstromen voorkomen.

Ieder traject bestaat uit een geheel aantal rekenelementen van gelijke lengte. Omdat in ieder traject alle procesparameters konstant zijn, dient bij de modelopzet geanalyseerd te worden welke indeling in trajekten het meest geëigend is.

Rekenelementen kunnen gedefinieerd worden afhankelijk van hun specifieke functie in het netwerk. In totaal worden 10 elementtypen onderscheiden:

- 1) bovenstroomse randvoorwaarde (bron)
- 2) standaard element
- 3) element juist bovenstrooms van een samenkomst van trajekten, in de hoofdstroom
- 4) element ter plaatse van een samenkomst van trajekten
- 5) benedenstrooms uitstroomeinde
- 6) element waarin puntlozingen plaats hebben
- 7) element van waaruit onttrekkingen plaatsvinden
- 8) element direkt benedenstrooms van een splitsing, in de zijtak
- 9) element ter plaatse van een splitsing
- 10) element bovenstrooms van een stuw.

Iedere rivier of zijrivier begint met een element van het type 1). In principe bestaat het netwerk verder uit standaardelementen van het type 2), waarin ook diffuse instroming kan plaats hebben. Ter plaatse van lozingen en onttrekkingen dienen de elementen 6) respektievelijk 7) toegepast te worden, terwijl element 5) het benedenstroomse uiteinde bepaalt.

Voor de netwerkstructuur zijn de elementen 3), 4), 8) en 9) van belang.

Elementen 10) zijn van belang voor wat betreft het ontbreken van dispersie over de stuw heen als wel als het bijzondere beluchtingskarakter van een stuw.

Geometrisch kent het model de volgende beperkingen:

trajekten	maximaal 75
elementen	maximaal 20 per tak
	maximaal 500 totaal
bronnen	maximaal 15
samenvloeiingen	maximaal 15
splitsingen	maximaal 15
lozingen + ont-	
trekkingen	maximaal 90 samen
stuwen	maximaal 15.

Mochten deze maxima een belemmering vormen dan is het voor een gemiddeld programmeur eenvoudig deze maxima te verhogen. Dit is niet bijvoorbaat gedaan

om te voorkomen dat het model standaard grote hoeveelheden geheugen nodig zou hebben.

3.3 Hydrologie

MODQUAL verwacht konstante debieten van bovenstroomse randvoorwaarden (bronnen) als invoergegevens. In ieder element berekent het model de waterdiepte, de gemiddelde stroomsnelheid en de dispersiecoëfficiënt, afhankelijk van het debiet ter plaatse en de hydraulische karakteristieken van het traject waar het element toe behoort.

Bij lozingen en onttrekkingen dient het betrokken debiet opgegeven te worden. Het model berekent het resulterend rivierdebiet. Dit is ook het geval bij samenkomst van twee trajekten.

Bij splitsing in twee trajekten kan de verdeling opgelegd worden, door één van de twee debieten op te geven. Het is echter ook mogelijk het model de verdeling te laten berekenen uit dezelfde weerstandsformules en coëfficiënten die ten grondslag liggen aan de waterdiepte en stroomsnelheidsberekeningen.

Diffuse instroming dient voor ieder traject opgegeven te worden als een debiet. Dit debiet wordt in het model gedeeld door het aantal elementen van het traject om de diffuse toestroming per element te berekenen.

Omdat gedurende de simulatie geen vergroting of verkleining van de berging plaats heeft en het model volledig massabehoudend is, is de som van geloosde en toegestroomde vrachten gelijk aan de afgebroken en uitgestroomde vracht.

3.4 Tijdschaal

MODQUAL is een steady-state model, dat houdt in dat geen tijdsafhankelijkheid van debieten gemodelleerd wordt.

Het is wel mogelijk om bij konstant debiet simulaties te verrichten met tijdsafhankelijke parameters en lozingen. Zo kan een dag/nachtcyclus van de algengroei gemodelleerd worden en, vermits het dispersief gedrag juist gemodelleerd is, een plotselinge kalamiteit.

Voor fluktuierende debieten staan twee vormen van kwasi-dynamische modellering open. De eerste vorm bestaat uit het verdelen van een jaar in perioden van een maand, 4 weken of een kwartaal. Deze 12, 13 of 4 simulaties leveren dan gezamenlijk een jaarbeeld op. Deze methode verlangt dat de simulatieperiode voldoende lang is ten opzichte van de looptijd. Deze methode wordt toegepast in het kader van het project "Waterkwaliteitsmodel Rijn".

De tweede methode bestaat uit het volgen van pakketten water met een meebewegend assenstelsel (zogenaamde Lagrange coördinaten). Voorwaarde is hier dat de tijdspanse tussen twee pakketjes voldoende groot is om geen inbreuk te maken op de vooronderstelling dat tussen twee opvolgende pakketten geen uitwisseling bestaat. Deze methode wordt momenteel geïmplementeerd ten behoeve van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Maas" omdat daar, gedurende de zomer periode niet voldaan wordt aan de eisen met betrekking tot looptijd en simulatieperioden.

4 Wiskundige formulering

De wiskundige formulering valt uiteen in de stof-transportvergelijking en in de kinetiektermen. Samen vormen zij de integrale modelvergelijking. De diskrete versie van de transportvergelijking kan ontstaan door een waterbalans van elementen op te stellen. De limiet voor de tijdstap en de plaatsstap naar 0 doet de differentiaalvergelijking ontstaan.

Afzonderlijk worden de stroomsnelheid, waterdiepte, dwarsdoorsnede en dispersie berekend, die een rol spelen in de coëfficiënten van de stof-transportvergelijking en de kinetiektermen.

4.1 Transportvergelijking

4.1.1 Balansrepresentatie

In figuur 2 is een rekenelement weergegeven, zoals dat in het model wordt gebruikt. Linksboven wordt het element in een riviertak weergegeven. In het midden is de waterbalans te zien. De onderste representatie betreft de stofbalans.

De waterbalans is opgebouwd uit drie termen:

Q_{i-1} - instroming vanuit het vorige element

Q_{x_1} - als lozing toestromend (negatief bij onttrekking) of diffuus toestromend debiet

Q_i - uitstroming naar het volgende element.

Er wordt in het model niet gerekend met verdamping. Regen is eventueel wel te modelleren middels diffuse instroming. Het betreft hier echter processen die ten opzichte van het debiet vaak slechts een uiterst marginale betekenis hebben.

De stofbalans kent in principe dezelfde drie termen in de vorm van stofvrachten.

Daarbij komen echter nog de uitwisseling middels dispersie en de reactiekinetische termen.

$(QC)_{i-1}$ - vracht uit het vorige element

$(Q_x C_x)_i$ - lozingsvracht of diffuse vracht (voor onttrekkingen wordt $Q_x C_i$ genomen)

- $(QC)_i$ - vracht naar het volgende element
 $-\{AD_L \frac{\partial C}{\partial x}\}_{i-1}$ - uitwisseling met vorig element
 $-\{AD_L \frac{\partial C}{\partial x}\}_i$ - uitwisseling met volgend element (voor een stuw is deze term 0)
 s_i - reaktietermen

met Q - debiet
 C - concentratie
 A - dwarsdoorsnede
 D_L - longitudinale dispersie
 x - koördinaat in langsrichting.

Zo ontstaat vergelijking (1) met ΔM_i als de massatoename.

$$\Delta M_i = (QC)_{i-1} - (QC)_i - (AD_L \frac{\partial C}{\partial x})_{i-1} + (AD_L \frac{\partial C}{\partial x})_i + (Q_x C_x)_i + s_i \quad (1)$$

Voor een steady-state simulatie geldt $\Delta M_i = 0$

met $(\frac{\partial C}{\partial x})_i = \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta x}$ ontstaat dan

$$\begin{aligned}
 &\{Q_{i-1} + \frac{A_{i-1} D_L}{\Delta x}\} C_{i-1} - \{Q_i + \frac{A_{i-1} D_L}{\Delta x} + \frac{A_i D_L}{\Delta x}\} C_i \\
 &+ \frac{\{A_i D_L\}}{\Delta x} C_{i+1} + (Q_x C_x)_i + s_i = 0
 \end{aligned} \quad (2)$$

Wanneer alle termen van (2) gedeeld worden door het elementvolume (V_i) ontstaat een vergelijking voor concentraties in plaats van vrachten. Deze laatste vergelijking wordt in MODQUAL opgelost. Aangezien voor ieder element zo'n vergelijking opgelost moet worden ontstaat een matrix, zo groot als het aantal gebruikte elementen.

4.1.2 Differentiaalvergelijking

Wiskundig gezien is vergelijking (1) ook te schrijven als de differentiaalver-

gelijking (3).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right\} - \frac{\partial}{\partial x} \{ uC \} - \text{decay} * C$$

$$+ (\text{lozingen} - \text{onttrekkingen}) / \text{debiet} \quad (3)$$

Hierbij is een konstant volume van de rivier verondersteld. De grootheid u staat voor de gemiddelde snelheid over de dwarsdoorsnede.

Vergelijking (3) is op te lossen met behulp van de wiskundige techniek van de eindige differentiemethode. De in MODQUAL toegepaste vorm is gebaseerd op een volledig impliciet schema. Voor de steady-state versie reduceert zich dat tot de eerder genoemde vergelijking (2).

Hoewel het wiskundig instrumentarium aanwezig is voor een niet-steady-state benadering zijn nog geen bijbehorende in- en uitvoer routines beschikbaar en is van deze mogelijkheid van het model nog geen gebruik gemaakt.

Hugto en Loucks [6] brachten enige wijzigingen aan in het numerieke schema, zodat van toepassing van de eindige elementermethode gesproken kan worden.

Hun belangrijkste wijziging betrof het reduceren van de numerieke dispersie, die voornamelijk bij dynamische toepassing op de voorgrond treedt.

4.2 Hydraulische karakteristieken

Met de debietbalans (4) is het debiet in het netwerk te berekenen:

$$Q_{\text{uit}} = Q_{\text{in}} + Q_{\text{zijrivieren}} + Q_{\text{diffuus}} - Q_{\text{onttrekkingen}} \quad (4)$$

In de dispersieterm komt de dwarsdoorsnede voor en in de kinetiekterm s_1 van vergelijking (2) komen echter ook snelheid en waterdiepte voor. De dwarsdoorsnede bepaling volgens (5) maakt ook berekening van de snelheid noodzakelijk.

$$A = \frac{\text{debiet}}{\text{gemiddelde snelheid}} = \frac{Q}{u} \quad (5)$$

Snelheid en waterdiepte kunnen in MODQUAL op twee manieren berekend worden. Wanneer de koëfficiënten a_1 en a_2 zowel als de exponenten e_1 en e_2 gegeven worden kunnen diepte en snelheid middels (6) en (7) berekend worden uit het debiet Q .

$$\bar{u} = a_1 Q^{e_1} \quad (6)$$

$$d = a_2 Q^{e_2} \quad (7)$$

Een alternatief is het gebruik van Mannings vergelijking (8)

$$Q = \frac{1}{n} \cdot A_x \cdot R_x^{2/3} \cdot S_e^{1/2} \quad (8)$$

met n = ruwheidsfaktor van Manning

A_x = dwarsdoorsnede van de rivier (m^2)

R_x = gemiddelde effectieve hydraulische straal (m)

S_e = helling van het stromend oppervlak

Q = debiet (m^3/s).

Deze formule ontstaat ook uit de weerstandsformule van Chézy wanneer voor de de Manning koëfficiënt $n = R^{1/6}/C$ genomen wordt met C als Chézy-koëfficiënt.

Wanneer bekend is hoe de doorsnede afhangt van de diepte kan (8) iteratief opgelost worden en volgt de gemiddelde snelheid $\bar{u}$ uit (9).

$$\bar{u} = \frac{Q}{A_x} \quad (9)$$

Beide benaderingen komen in principe op hetzelfde neer, zoals zal blijken.

R_x wordt voor rechthoekige doorsneden wel met de waterdiepte d benaderd wanneer het bed relatief breed is. Wanneer dan de doorsnede A_x als breedte * diepte genomen wordt (B.d) eventueel nog met

$$B = kQ^{0,1} \quad (10)$$

Dan ontstaat uit (8) vergelijking (11)

$$d = \left(\frac{n}{k S_e^{1/2}} \right)^{0,6} \cdot Q^{0,54} \quad (11)$$

en voor de snelheid ontstaat dan (12)

$$\bar{u} = \left(\frac{s_e^3}{n \cdot k^2} \right)^{0,1} \cdot Q^{0,36} \quad (12)$$

waarin zich de formules (6) en (7) later herkennen. Onder wat andere veronderstellingen ontstaan ook wat andere koëfficiënten.

Een bijzondere zetting van koëfficiënten ontstaat bij een volledig gestuwde rivier als de Maas bij laag water. De diepte is dan onafhankelijk van het debiet, waarmee $e_2 = 0$ wordt. De gemiddelde stroomsnelheid is dan rechtevenredig met het debiet omdat de dwarsdoorsnede niet verandert, dus $e_1 = 1$.

Voor tussenliggende situaties zullen de koëfficiënten ook tussenliggende waarden vertonen. Aangezien voor de Maas een snelheidstabel bij verschillend debiet en een set verhanglijnen bij verschillend debiet ter beschikking stond, zijn deze waarden direkt in het model ingevoerd als a_1 en a_2 , waarbij zowel e_1 als e_2 nul gesteld zijn.

De stroomverdeling bij splitsingen wordt berekend zodanig dat de waterdiepte in de beide takken, direkt na de splitsing, gelijk is. Door onvolkomenheden in de benaderingsformules (6) en (7) of in de weergave van de geometrie van de doorsnede en het verhang voor formule (8), zou een ongewenste verdeling bij splitsingen kunnen ontstaan.

Voor dié gevallen kan het debiet bij splitsingen ook direkt opgegeven worden.

Voor de longitudinale dispersie kwam Elder [2] tot formule (13) voor kanalen met een uniforme dwarsdoorsnede.

$$DL = k \cdot d \cdot u^* \quad (13)$$

k is een kostante van ca. 5,93

d is de gemiddelde diepte

u^* is de schuifspanningssnelheid.

Met (14), (15) en met de veronderstelling dat voor brede rivieren de straal R gelijk aan de waterdiepte genomen mag worden, ontstaat dan (16)

$$u^* = \frac{1}{C} \cdot \sqrt{g} \cdot \bar{u} \quad (14)$$

$$C = \frac{R^{1/6}}{n} \quad (15)$$

$$D_L = 18,57 \cdot n \cdot \bar{u} \cdot d^{5/6} \quad (16)$$

met u^* = schuifspanningssnelheid

C = Chézy-koëfficiënt

g = versnelling van de zwaartekracht

$\bar{u}$ = gemiddelde snelheid over de dwarsdoorsnede

R = hydraulische straal

n = Manning-koëfficiënt

D_L = longitudinale dispersie.

Dit is ook de formule die in MODQUAL wordt gebruikt. Voor natuurlijke rivieren met een niet-uniforme dwarsdoorsnede kan de dispersie echter al gauw een faktor 10 hoger zijn. Dit vindt zijn voornaamste oorzaak in het feit dat de snelheidsverschillen over de dwarsdoorsnede en de middeling daarna over die dwarsdoorsnede, de voornaamste bron van longitudinale dispersie zijn (fig. 3).

De ruwheidskoëfficiënt van Manning is door Henderson [5] getabelleerd volgens tabel 3.

Natuurlijke rivieren	n
schoon, recht	0,025-0,030
bochtig met ondiepten	0,033-0,040
erg begroeid, bochtig	0,075-0,150
heldere, rechte, alluviale beddingen	0,0175 $d^{1/6}$
met d de korreldiameter in cm waar 75% van de bodemdeeltjes beneden blijft	

Tabel 3 Manning's n voor rivieren volgens Henderson [5]

Met (15) kan echter ook gesteld worden:

$$n = \frac{C}{R^{1/6}} \quad \text{en} \quad C = 18 \cdot 10^{\log \frac{12R}{k}} \quad (17)$$

zodat (18) ontstaat.

$$n = \frac{18}{R^{1/6}} \cdot 10^{\log \frac{12R}{k}} \quad (18)$$

Hierin is k de bodemruwheid. Het zal duidelijk zijn dat in de betreffende koëfficiënten zoveel processen geaggregeerd zijn dat de hydraulische karakteristieken onderwerp van enige kalibratie kunnen zijn.

4.3 Reactie-kinetiek

In paragraaf 3.1 werd een opsomming gegeven van de momenteel in het model opgenomen toestandsvariabelen. Deze zijn in een aantal groepen onder te verdelen.

- I konservatieve en onafhankelijke niet-konservatieve stoffen
- II de koolstofcyclus met BZV en CZV
- III de fosforcyclus met ortho-fosfaat en partikulair en organisch fosfor
- IV de stikstofcyclus met organisch en partikulair stikstof, ammonium, nitrriet en nitraat
- V de algencyclus met algenbiomassa en detritus
- VI zuurstof.

De variabelen van groep V bevatten koolstof, stikstof en fosfor maar hebben een eigen dynamiek. Zuurstof, of het zuurstofdeficiet, is de resultante van de processen onder II, IV en V.

Het geheel is in figuur 1 schematisch weergegeven. Van ieder onderdeel zal in de navolgende paragrafen een gedetailleerde beschrijving worden gegeven.

4.3.1 Konservatieve en niet-konservatieve stoffen

In de op te lossen differentievergelijking (2) wordt voor conservatieve stoffen de reaktieterm $s_i = 0$ genomen.

Voor de niet conservatieve stoffen zijn verschillende reaktietermen s_i mogelijk. In principe zijn de bijzondere stoffen, zoals stikstofcomponenten en fosfaat, bijzondere vormen van een niet-konservatieve stof, die al in het model voorgeprogrammeerd zijn.

De eenvoudigste reaktieterm is (19).

$$\frac{dC}{dt} = -kC \quad (19)$$

Hierin is k de afnamekoëfficiënt. In deze vorm zijn bijvoorbeeld bacteriën of radionucleïden te modelleren waarbij van een eerste-orde afbraakproces uitgegaan wordt.

Bezinking kan een andere vorm zijn (20)

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{k}{d} C \quad (20)$$

De koëfficiënt wordt hier gedeeld door de waterdiepte d . De koëfficiënt k heeft de vorm van een valsnelheid met de dimensie meter/dag. Wanneer de waterkolom overigens als gemengd wordt beschouwd, ontstaat door in (20), door de waterdiepte in meters te delen, een afnamekoëfficiënt met de dimensie 1/dag. Beide koëfficiënten kunnen ook gekombineerd voorkomen in de vorm van (21).

$$\frac{dC}{dt} = -(k_1 + \frac{k_2}{d}) C \quad (21)$$

Op deze wijze is bijvoorbeeld BZV voorgeprogrammeerd, zoals in paragraaf 2.3.2 zal blijken.

De koëfficiënten kunnen positief zijn wanneer groei op kan treden (k_1) of wanneer een bepaalde hoeveelheid stof per tijdseenheid van de bodem komt (k_2). Verder kan op willekeurige wijze een afhankelijkheid van temperatuur, stroomsnelheid of een eerder in het model berekende grootte ingebouwd worden. De enige limitering is dat de kinetiek lineair in het gehalte van de te berekenen stof dient te zijn. Voor niet-lineaire kinetiek zal een aparte iteratieprocedure toegepast moeten worden, zoals beschreven in 4.4.2.

4.3.2 Koolstof

In het model MODQUAL worden wat betreft de koolstofcyclus 3 frakties onderscheiden.

1. Algen en detritus BZV
2. Overig BZV
3. Niet biochemisch afbreekbaar koolstof.

CZV wordt als de som van 1, 2 en 3 gezien. BZV wordt als de som van 1 en 2 gezien. De kinetiek van 1 wordt in paragraaf 4.3.5 behandeld. De kinetiek van 2 wordt door vergelijking (22) weergegeven.

$$\frac{d \text{ BZV}}{dt} = -(\text{Afbraak} + \frac{\text{Bezinking}}{\text{diepte}}) \cdot \text{BZV} \quad (22)$$

De afbraakterm is temperatuursafhankelijk opgenomen (23).

$$\text{Afbraak} = \text{Afbraak}_{20^\circ\text{C}} \cdot 1,047^{(T-20)} \quad (23)$$

De bezinkingsterm kan stoichiometrisch gekoppeld worden aan die van partikulair fosfor. Deze laatste optie kan nuttig zijn als een belangrijk deel van het BZV zich in oplossing bevindt en als dat gedeelte wat bezinkt een vaste verhouding heeft tot het partikulair fosfor. Door de vaste stoichiometrie kan men dan uitsluitend de partikulaire fraktie laten bezinken, terwijl de bezinking in vergelijking (22) op het gehele BZV-gehalte werkt. De kinetiek wordt dan weergegeven door vergelijking (24).

$$\frac{d \text{ BZV}}{dt} = -\text{Afbraak} \cdot \text{BZV} - F_{\text{stoich}} \cdot \frac{\text{Bez}_{\text{PART P}}}{\text{diepte}} \cdot \text{PART P} \quad (24)$$

De afbraaksnelheid is soms geen konstante. Het BZV bestaat uit verschillende frakties, waarvan de ene beter afbreekbaar is dan de andere. In aanvang zal het best afbreekbare deel eerst afbreken met hoge snelheid, dan kunnen de frakties overblijven met lagere afbraaksnelheid en daalt de gemiddelde coëfficiënt.

Men kan in MODQUAL de afbraaksnelheid afhankelijk laten zijn van de hoeveelheid reeds afgebroken materiaal. Met name voor wat betreft het waterkwaliteitsmodel voor de Rijn is dit een belangrijk aspect, zodat voor de wijze waarop deze optie is toegepast naar het verslag R 1056-VII/5321-VI verwezen wordt.

Wat betreft de CZV-modellering wordt het niet-afbreekbare deel naar believen afzonderlijk gemodelleerd als konservatieve stof of als stof met alleen bezin-

king. Wanneer zowel het overig BZV als het niet-afbreekbare CZV op deze wijze berekend zijn wordt door optelling van alle frakties het volledig CZV verkregen.

4.3.3 Fosfor

De fosforcyclus kent 3 frakties.

1. Fosfor in algen en detritus
2. Overig partikulair fosfor + opgelost organisch fosfor
3. Ortho-fosfaat.

Partikulair fosfor wordt als de som van 1 en 2 benaderd omdat het opgelost organisch P meestal slechts een klein aandeel betreft. De kinetiek van fraktie 1 wordt in paragraaf 4.3.5 behandeld. De overige partikulaire fraktie 2 wordt met vergelijking (25) gemodelleerd

$$\frac{d P_{part}}{dt} = Ads.OrthoP - \frac{Bezinking}{diepte} \cdot P_{part} \quad (25)$$

De eerste term van het rechter lid staat voor de adsorptie van ortho-fosfaat aan partikulair materiaal tot partikulair fosfaat. In eerste instantie is deze term afhankelijk genomen van het gehalte ortho-fosfaat. Wanneer ooit tot modellering van zwevend stof, het calcium-carbonaatevenwicht en de pH besloten zou worden is wellicht meer detail in deze term aan te brengen.

De bezinkingssnelheid werkt op het totale gehalte aan overig partikulair fosfor.

De ortho-fosfaatkinetiek wordt weergegeven door vergelijking (26).

$$\frac{d OrthoP}{dt} = \frac{Rel}{diepte} - Ads.OrthoP - Groei.Faktor.Algent + Afbr.Faktor.Detritus \quad (26)$$

De eerste term van het rechter lid staat voor het vrijkomen van ortho-fosfaat uit de bodem. Deze term heeft een temperatuursafhankelijkheid volgens (27)

$$Rel = Rel_{20^{\circ}C} \cdot 1,07^{(T-20)} \quad (27)$$

De tweede term betreft de eerder beschreven adsorptie van ortho-fosfaat tot partikulair fosfor. De derde term betreft de opname door algen, waar de groei staat voor de netto opname (opname minus respiratie) en de faktor de konversie verzorgt van algen biomassa-eenheden naar fosfor. De vierde term is het produkt van de afbraak van dode algenresten, detritus. De grootte van deze termen wordt in 4.3.5 behandeld.

4.3.4 Stikstof

In de stikstofcyclus worden de volgende frakties onderscheiden.

1. Stikstof in algen en detritus
2. Organisch plus overig partikulair stikstof
3. Ammonium-stikstof
4. Nitriet-stikstof
5. Nitraat-stikstof.

Partikulair + organisch opgelost stikstof bestaat uit 1 + 2, Kjeldahl stikstof uit 1, 2 en 3 terwijl 4 en 5 samen het geoxideerde stikstof vormen. De kinetiek van fraktie 1 wordt in 4.3.5 beschreven.

Wat betreft fraktie 2 wordt de reaktieterm gegeven door vergelijking (28).

$$\frac{d \text{ OrgN}}{dt} = -\text{Afbraak} \cdot \text{OrgN} - \frac{\text{Bezinking}}{\text{diepte}} \cdot \text{OrgN} + \text{Resp.Faktor} \cdot \text{Algen} \quad (28)$$

De eerste term van het rechterlid staat voor de afbaak naar ammonium. De afbraakcoëfficiënt is temperatuursafhankelijk volgens (29).

$$\text{Afbraak} = \text{Afbraak}_{20^{\circ}C} \cdot 1,047^{(T-20)} \quad (29)$$

De bezinking is middels een stoichiometrische konstante te koppelen aan die van partikulair fosfor. In dat geval ontstaat, analoog aan de bezinking van BZV, vergelijking (30). Wanneer (28) gebruikt wordt werkt de bezinking op het totale gehalte opgelost organisch + partikulair stikstof. Dit is alleen dan realistisch wanneer hun onderlinge verhouding niet sterk wijzigt.

$$\frac{d \text{OrgN}}{dt} = -\text{Afbraak.OrgN} - F_{\text{stoich}} \cdot \frac{\text{Bez}_{\text{PARTP}}}{\text{diepte}} \cdot \text{PARTP} + \text{Resp.Faktor.Algen} \quad (30)$$

De derde term in de rechterleden van (28) en (30) betreft de algenrespiratie vermenigvuldigd met een konversiefaktor van algenbiomassa naar stikstof. In vergelijking (26) wordt in de groei al gecorrigeerd voor respiratie bij de opname van ortho-fosfaat. In de stikstofcyclus bestaat de mogelijkheid de bruto hoeveelheid voor groei benodigd stikstof in de vorm van ammonium of nitraat te laten opnemen en de respiratie naar de fraktie van het opgelost organisch stikstof te laten plaats hebben. De hoogte van deze termen wordt in 4.3.5 behandeld.

De reaktieterm voor ammonium bestaat uit (31).

$$\frac{d \text{NH}_4^+}{dt} = +\text{Afbraak.OrgN} - \text{Nitrif.NH}_4^+ + \frac{\text{Rel}}{\text{diepte}} - \gamma \cdot \text{Groei.Faktor.Algen} + \text{Afbr.Faktor.Detritus} \quad (31)$$

De eerste term van het rechterlid bestaat uit het afgebroken organisch stikstof. De tweede term uit het genitrificeerd ammonium. In de derde term wordt het vrijkomen van ammonium uit de bodem weergegeven. De twee laatstgenoemde processen zijn temperatuursafhankelijk opgenomen volgens (32) en (33).

$$\text{Nitrif} = \text{Nitrif}_{20^\circ\text{C}} \cdot 1,08^{(T-20)} \quad (32)$$

$$\text{Rel} = \text{Rel}_{20^\circ\text{C}} \cdot 1,07^{(T-20)} \quad (33)$$

De vierde term van het rechterlid geeft de opname door algen weer. De groei is hier niet gecorrigeerd voor respiratie, zoals bij ortho-fosfaat. De faktor staat voor de omzetting van algenbiomassa-eenheden in stikstof en met γ wordt de fraktie van de algenpopulatie aangegeven die voor zijn levensonderhoud primair op ammonium aangewezen is. Van de overige algen wordt aangenomen dat ze nitraat opnemen. In de biologie wordt ervan uitgegaan, dat bij een voldoende hoog ammoniumgehalte, γ tot 1,0 kan naderen.

De vijfde term in (31) staat voor de afbraak van afgestorven algenmateriaal naar ammonium. De grootte van de koëfficiënten in de laatste twee termen zal in 4.3.5 aan de orde komen.

De reaktiekinetiek van nitriet is die van een stof met een doorgeeffunctie (34).

$$\frac{d \text{NO}_2^-}{dt} = +\text{Nitrif} \cdot \text{NH}_4^+ - \text{Nitraf} \cdot \text{NO}_2^- \quad (34)$$

De nitrifikatie van ammonium naar nitriet is doorgaans een beduidend langzamer proces dan het nitrifikatieproces van nitriet naar nitraat in (34) aangeduid met "nitraf", zodat de hoeveelheid nitriet doorgaans niet groot zal zijn. Het nitrifikatieproces is temperatuursafhankelijk volgens (35).

$$\text{Nitrif} = \text{Nitrif}_{20^\circ\text{C}} \cdot 1,08^{(T-20)} \quad (35)$$

De laatste stikstofstoestandsvariabele is nitraat met als reactievergelijking (36).

$$\frac{d \text{NO}_3^-}{dt} = +\text{Nitrif} \cdot \text{NO}_2^- - \frac{\text{Denit}}{\text{diepte}} - (1-\gamma) \cdot \text{Groei} \cdot \text{Faktor} \cdot \text{Algen} + \text{Afbr} \cdot \text{Faktor} \cdot \text{Det} \quad (36)$$

Als eerste proces het nitrifikatieproces van nitriet naar nitraat; het tweede proces in het rechterlid van (36) betreft het denitrifikatieproces, wat als een bodemproces is weergegeven met als temperatuursafhankelijkheid (37).

$$\text{Denit} = \text{Denit}_{20^\circ\text{C}} \cdot 1,06^{(T-20)} \quad (37)$$

De derde term in het rechterlid van (36) geeft de algenopname weer. De groei is ook hier niet gecorrigeerd voor respiratie, de faktor vertaalt ook hier algenbiomassa-eenheden in stikstof en γ was de eerder besproken koëfficiënt die de verdeling aangeeft tussen algen die op ammonium leven en die op nitraat leven. De laatste term staat voor de afbraak van detritus.

4.3.5 Algen en detritus

De algencyclus bestaat uit algen zelf en het zwevende dode algenmateriaal (detritus). De uitkomst van de algencyclus, vermenigvuldigd met betreffende konversiefactoren bepaalt de in vorige paragrafen bedoelde gehalten N, P en BZV in algen en detritus.

In de algenmodellering worden de volgende factoren onderscheiden.

- netto groei : de in het veld te konstateren biomassatoename (of in geval van negatieve groei: afname)
- bezinking : het uit de waterfase naar de bodem zinken van levend algenmateriaal

- sterfte : het in de waterfase overgaan van levend algenmateriaal in dood algenmateriaal
- respiratie : het uitscheiden van CO₂ en nutriënten in verband met het eigen onderhoud
- bruto groei : de bruto opname van nutriënten en afgifte van zuurstof

bruto groei - respiratie - sterfte - bezinking = netto groei.

In de originele versie van QUAL II is een bruto groeiterm gedefinieerd als een produkt van de groei-afhankelijkheden van stikstof, fosfor en licht. Voor deze groei-afhankelijkheden is dan ook nog de Monod-formule (38) toegepast. Deze heeft als nadeel dat wanneer de concentratie C al 9 maal de halfwaarde $k_{\frac{1}{2}}$ is,

$$\mu = \frac{\mu_{\max} C}{k_{\frac{1}{2}} + C} \quad (38)$$

de groeisnelheid nog slechts 90% van $\mu_{\max}$ is, terwijl nauwelijks limitering optreedt. Door de vermenigvuldigregel komt men voor 3 factoren waarvan het gehalte 9 maal de halfwaarde konstante is toch slechts tot een groei van 73% van $\mu_{\max}$. Aangezien het water in Nederlandse rivieren dermate rijk is aan nutriënten dat om die reden geen limitering zal optreden, is van een nutriënteneffekt op de groei afgezien. In het geval dat een invloed van bijvoorbeeld defosfatering op de algengroei in watergangen onderzocht moet worden is een nutriëntafhankelijkheid van de groei eenvoudig te inkorporeren. Een alternatieve formule voor (38) zou dan kunnen zijn:

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_{\max} & C > C_{\lim} \\ \mu &= \frac{C}{C_{\lim}} \mu_{\max} & C < C_{\lim} \end{aligned} \quad (39)$$

Met C = de aktuele concentratie

$C_{\lim}$ = de concentratie waar beneden limitering optreedt

$\mu_{\max}$ = de maximale groei

μ = de aktuele groei.

Vooralsnog is dus slechts de lichtafhankelijkheid van de groei in het model opgenomen.

Figuur 4 geeft een beeld van een mogelijke groeicurve ten gevolge van lichtinvloeden. Wanneer het algengehalte volledig gemengd is over de diepte en wanneer de lichtintensiteit volgens de wet van Fick negatief exponentieel afneemt naar de waterdiepte ontstaat formule (40).

$$\bar{\mu} = \frac{1}{d} \int_{z_0}^{z_B} \mu(I) dz = \frac{1}{d} \int_{z_0}^{z_B} \mu \{ I_0 \exp(-\epsilon z) \} dz \quad (40)$$

z = vertikale koördinaat

z_0 = z -oppervlak

z_B = z -bodem

d = waterdiepte

μ = groeisnelheid

$\bar{\mu}$ = de over de diepte gemiddelde groeisnelheid

I = lichtintensiteit

I_0 = lichtintensiteit aan het oppervlak

ϵ = extinktiekoëfficiënt.

Wanneer (40) echter naar I geïntegreerd wordt in plaats van naar z , ontstaat (41).

$$\bar{\mu} = \frac{1}{\epsilon d} \int_{I_B}^{I_0} \frac{\mu(I)}{I} dI \quad (41)$$

In het geval I aan de bodem (I_B) vrijwel 0 is en I aan het oppervlak (I_0) groter is dan de waarde in figuur 4 waarboven geen groei meer optreedt, is de integraal in (41) onafhankelijk van de lichtintensiteit I geworden. Met (42) ontstaat dan (43), die als aantrekkelijke eigenschappen heeft dat de lichtintensiteit zelf niet opgegeven hoeft te worden.

$$k = \int_0^{I_{\max}} \frac{\mu(I)}{I} dI \quad (42)$$

$$\bar{\mu} = \frac{k}{\epsilon d} \quad (43)$$

Rest nog de invloed van een ondiepe heldere stroom te onderzoeken, zodat $I_B \neq 0$ is. Van integraal (42) moet dan (44) afgetrokken worden.

$$k' = \int_0^{I_B} \frac{\mu(I)}{I} dI \quad (44)$$

wanneer zich dit in het lineaire deel van de curve afspeelt zal k' gelijk zijn aan $k_2 I_B$ met k_2 de initiële helling van de $\mu(I)$ curve. Anders wordt (44) $\mu_{\max} \ln(I_B)$. Ook wanneer $I_{\text{oppervlak}}$ niet hoger is dan de lichtintensiteit waarboven geen groei meer optreedt, ontstaat een logaritmische term:

$\mu_{\max} \ln(I_{\text{opp}}) - K_2$ welke bij (43) opgeteld dient te worden. In dat geval is K_2 afhankelijk van de waarde van $I_{\max}$ in de integraal (4.2). Het zal in alle gevallen echter zo zijn dat $\bar{\mu}$ nooit groter wordt dan $\mu_{\max}$. Deze begrenzing is dan ook in het model MODQUAL aangebracht, tezamen met formule (43).

De extinktiecoëfficiënt ϵ is zelf weer afhankelijk van het algengehalte volgens (45), waarbij f_{ϵ} , de hoeveelheid extinktie per eenheid van algenbiomassa voorstelt.

$$\epsilon = \epsilon_{\text{achtergrond}} + f_{\epsilon} \cdot \text{algen} \quad (45)$$

De integraal (42) kan afhankelijk zijn van de daglichtlengte en/of de temperatuur, ze is in ieder geval lineair afhankelijk van de maximale groeisnelheid $\mu_{\max}$. Voor het projekt waterkwaliteitsmodel Rijn wordt bijvoorbeeld (46) gehanteerd, met f als daglichtlengte, T als temperatuur in graden celcius en $\mu_{\max}$ de maximale groei overdag bij 20° celcius.

$$k = f \cdot k_1 \cdot \mu_{\max} \cdot \frac{T}{20} \quad (46)$$

De konstante k_1 vloeit dan nog uit de vorm van de $\mu(I)$ curve voort.

De respiratie wordt meestal beschouwd een konstante maal de maximale groeisnelheid te zijn. Het is dus mogelijk de maximale groeisnelheid met een faktor voor de respiratie te corrigeren. Dit houdt voor de nutriëntopname in dat verondersteld wordt dat de gerespireerde hoeveelheid nutriënt vrijwel direkt weer beschikbaar is in de vorm als waarin ze voor de groei opgenomen wordt. Voor fosfaat zal dat ook vaak het geval zijn. Voor stikstof bestaat echter de mogelijkheid het gerespireerde in de vorm van organisch stikstof uit te laten scheiden door de respiratie expliciet op te nemen.

Het sterfteproces is gemodelleerd in de vorm van een eerste-orde proces naar detritus. De sterftecoëfficiënt kan afhankelijk van de temperatuur gekozen

worden.

De bezinking is analoog gemodelleerd aan de bezinking van overig partikulair materiaal. De mogelijkheid is echter geboden om voor algen een aparte valsnelheid in te voeren.

De netto groei is de resultante wanneer alle afnametermen van de bruto groei zijn afgetrokken.

Voor detritus geldt vergelijking (47).

$$\frac{d \text{ Det}}{dt} = \text{Sterfte.Algen} - \text{Afbraak.Det} - \frac{\text{Bezinking}}{\text{Diepte}} \cdot \text{Det} \quad (47)$$

Dit is een vergelijking analoog aan die van het overige BZV met als invoer de afgestorven algen. Een temperatuursafhankelijkheid van de afbraakterm is mogelijk. Middels vergelijking (47) wordt voor de zuurstofbehoefte en het vrijkomen van nutriënten uit detritus de juiste stoichiometrie gehanteerd.

4.3.6 Zuurstof

De zuurstofmodellering is gedeeltelijk onderhevig aan eigen processen, zoals reaeratie aan het wateroppervlak en zuurstofgebruik van de bodem, voor een belangrijk deel betreft het echter een afgeleide van de BZV, de stikstof en de algenmodellering.

In vergelijking (48) is een overzicht gegeven van alle betrokken reaktietermen.

$$\begin{aligned} \frac{d O_2}{dt} = & \frac{\text{reaeratie}}{\text{diepte}} \cdot (\text{Verz}-O_2) - \frac{\text{Bodemgebr.}}{\text{diepte}} \\ & + \text{Groei.Faktor.Algen} - \text{Afbr.Faktor.Detr} \\ & - \text{Afbr.BZV} - \text{Nitrif.Konv}_1 \cdot \text{NH}_4^+ \\ & - \text{Nitraf.Konv}_2 \cdot \text{NO}_2^- + \text{beluchting bij stuwen} \end{aligned} \quad (48)$$

In de eerste term van het rechter lid is de reaeratie uitgedrukt. Voor de berekening van de temperatuursafhankelijke verzadigingswaarde wordt (49) gebruikt, met T in °C.

$$\text{Verz} = 14,64 - 0,4106T + 0,00795T^2 - 0,0000776T^3 \quad (49)$$

De verzadigingswaarde wordt niet gecorrigeerd voor druk of chloridegehalte. Voor wat betreft de reaeratiekoëfficiënt kan gekozen worden uit de volgende opties:

- Churchill, Elmore en Buckingham (1962) [1]
- O'Connor en Dobbins (1958) [11]
- Owens, Edwards en Gibbs (1964) [12]
- Thackston en Krenkel (1966) [14]
- Langbien en Durum (1967) [7]
- Tsivoglou en Wallace (1972) [15]
- een willekeurige eigen koëfficiënt.

Het bodemgebruik van zuurstof is afhankelijk gesteld van de temperatuur volgens (50).

$$\text{Bodemgebr} = \text{Bodemgebr}_{20^{\circ}\text{C}} \cdot 1,07^{(T-20)} \quad (50)$$

De algengroei en detritusafbraak zijn in 4.3.5 aan de orde geweest, de faktor staat daar voor de konversie van biomassa-eenheden naar zuurstofverbruik. Voor groei moet hier groei minus respiratie gezien worden. De BZV-afbraak kwam in 4.3.2 aan de orde en de nitrifikatie in 4.3.4.

De beluchting bij stuwen treedt vanzelfsprekend alleen bij stuwen op. Gekozen kan hier worden tussen een koëfficiënt werkend op het gehele deficit volgens (51), die als konstante opgegeven wordt of een koëfficiënt werkend op dezelfde wijze maar berekend volgens de formule van Gameson (52) [3].

$$\frac{d O_2}{dt} \text{ stuw} = C_{\text{stuw}} \cdot \frac{Q}{V} \cdot (\text{Verz} - O_2) \quad (51)$$

$$C_{\text{stuw}} = 0,104 \cdot (1,92 + 0,046T) \cdot H \quad (52)$$

met Q = debiet

V = volume van het element

C_{stuw} = beluchtungskoëfficiënt

T = temperatuur °C

H = valhoogte over de stuw.

Het feit dat hier gerekend wordt met een koëfficiënt werkend op het gehele deficiet doet de dimensieloze koëfficiënt C_{stuw} ontstaan.

4.4 Oplossingstechnieken

4.4.1 Het lineaire stelsel

Zoals in paragraaf 4.1.1 uiteengezet, wordt de differentievergelijking (53) opgelost.

$$\begin{aligned}
 C_{t+1}^i &= C_t^i + \left\{ \frac{Q^{i-1}}{V^i} + \frac{A^{i-1} D_L^{i-1}}{V^i \Delta x} \right\} C_{t+1}^{i-1} \cdot \Delta t \\
 &\quad - \left\{ \frac{Q^i}{V^i} + \frac{A^{i-1} D_L^{i-1} + A^i D_L^i}{V^i \Delta x} \right\} C_{t+1}^i \cdot \Delta t \\
 &\quad + \left\{ \frac{A^i D_L^i}{V^i \Delta x} \right\} C_{t+1}^{i+1} \Delta t + \left\{ \frac{Q_x^i C_x^i}{V^i} + s_i \right\} \cdot \Delta t
 \end{aligned} \tag{53}$$

Dit is een impliciete vergelijking voor C_{t+1}^i . Hier staat C_t^i voor concentratie in element i op tijdstip t , de betekenis van de overige termen is gelijk aan die in vergelijkingen (1) en (2). De reaktieterm s_i mag lineair in C zijn, dus 0^e en 1^e orde kinetiek is toegestaan.

Vergelijking (53) laat zich anders schrijven als (54).

$$\begin{aligned}
 C_t^i + s_i &= T_1^i C_{t+1}^{i-1} + T_2^i C_{t+1}^i + T_3^i C_{t+1}^{i+1} \\
 \text{met } T_1^i &= \left\{ -\frac{A^{i-1}}{V^i} - \frac{A^{i-1} D_L^{i-1}}{V^i \Delta x} \right\} \cdot \Delta t
 \end{aligned} \tag{54}$$

$$T_2^i = \left\{ +\frac{A^i}{V^i} + \frac{A^{i-1} D_L^{i-1} + A^i D_L^i}{V^i \Delta x} - s_i^2 \right\} \cdot \Delta t + 1$$

$$T_3^i = \left\{ - \frac{A^i D_L^i}{V^i \Delta x} \right\} \cdot \Delta t$$

$$s_1^1 = \left\{ \frac{Q_x^i C_x^i}{V^i} + \text{konstante component van } s_1 \right\} \cdot \Delta t$$

$$s_1^2 = \text{eerste-orde component van } s_1$$

Wanneer (54) voor alle elementen uitgeschreven wordt, en er wordt op matrix-notatie overgegaan ontstaat (55). Deze kan ook als (56) worden geschreven.

$$\bar{C}_t + \bar{s} = T \bar{C}_{t+1} \quad (55)$$

$$\bar{C}_{t+1} = T^{-1}(\bar{C}_t + \bar{s}) \quad (56)$$

Bij steady-state simulatie verdwijnt in (54) de term C_t^i en verdwijnt in T_2^i de term +1, zodat met $U = T-1$ dan (57) ontstaat.

$$\bar{C} = U^{-1} \bar{s} \quad (57)$$

Wanneer (56) gebruikt wordt voor dynamische simulatie van lozingen, bij konstant debiet, treedt enige numerieke dispersie op. Er zijn verschillende manieren om deze te reduceren. De eenvoudigste manier is wellicht die welke Hughto en Loucks [6] toepasten. Zij losten (1) op met de eindige elementenmethode met lineaire interpolatiepolynomen en kregen een te inverteren matrix welke men ook gekregen zou hebben bij toepassing van centrale differentie op de snelheidskomponent, of door de eerste-orde term van de numerieke dispersie van de dispersie in vergelijking (56) af te trekken. Alleen de lozings- en kinetiekvector $\bar{s}$ krijgt een iets ander karakter.

Omdat voor de projekten Rijn en Maas geen tijdsafhankelijk lozingsregime wordt gemodelleerd zijn deze verbeteringen nog niet in het model aangebracht.

4.4.2 Niet-lineaire componenten

Er zijn verschillende niet-lineariteiten denkbaar van s_1 in (53) die nog zonder modifikaties oplosbaar zijn. MODQUAL rekent immers met (57) voor alle te modelleren stoffen, per stof, de gehalten uit. Is een reactie lineair in de

betreffende variabele, maar wel afhankelijk van de grootte van het gehalte van eerder berekende variabelen, dan kan door de juiste volgorde van oplossen te kiezen de berekende variabele gebruikt worden voor de $\bar{s}$ -vectoren van de nog niet berekende variabelen.

Een voorbeeld daarvan is de temperatuur. Wanneer deze het eerst berekend wordt in het model, dan kunnen alle overige reaktiekonstanten een willekeurige temperatuursafhankelijkheid meekrijgen.

Niet zonder modifikaties oplosbaar zijn reacties die zich niet-lineair in de berekende variabele gedragen. Een BZV-afbraakkonstante die afhankelijk is van de hoeveelheid reeds afgebroken materiaal en een algengroei, die afhankelijk is van de extinktie van het licht in water, welke weer afhankelijk is van de hoeveelheid aanwezige algen, zijn voorbeelden hiervan.

Dan kan een iteratieve methode worden toegepast. Men neemt een bepaald verloop van het gehalte over de rivier aan, evalueert hiermee het niet lineaire deel van de reaktiekonstanten, en men neemt als nieuwe benaderende waarde van het gehalte over de rivier de oude waarde plus een konstante maal het verschil tussen van de gevonden waarden en de oude waarde.

Er kan onderzocht worden onder welke voorwaarden dit iteratieproces convergeert. Wanneer de niet-lineariteit gedacht kan worden als in (58), met als niet-lineaire konstante $k = f(C)$ ontstaat na overgang op de x -koördinaat langs de rivier bij konstante snelheid v , (59) als benadering voor C . De konstante k_0 is dan verkregen als $k_0 = f(C_0)$.

$$\frac{dC}{dt} = f(C) \cdot C \quad (58)$$

$$C_1 = C_0 \exp(k_0 \frac{x}{v}) \quad (59)$$

Wordt als nieuwe startwaarde gekozen $C'_1 = bC_1 + (1-b) C_0$, dan ontstaat als nieuwe benadering C_2 , (60).

$$C_2 = C_0 \exp(f(C'_1) \cdot \frac{x}{v}) \quad (60)$$

Met (61) als benadering voor $f(C'_1)$ ontstaat dan voor het verschil $C_2 - C'_1$, formule (62).

$$f(C'_1) = k_0 + \frac{dk}{dC} \cdot (C'_1 - C_0) = k_0 + a(C'_1 - C_0); \quad a = \frac{dk}{dC} \quad (61)$$

$$C_2 - C'_1 = (1-b)(C_1 - C_0) - C_1 [\exp\{ab(C_1 - C_0) \frac{x}{v}\} - 1] \quad (62)$$

Voor kleine waarden van de exponent in (62) ontstaat dan (63) als benadering van (62)

$$C_2 - C_1' = \{(1-b) + abC_1 \frac{x}{V}\} (C_1 - C_0) \quad (63)$$

Voor $(1-b) + abC_1 \frac{x}{V} < 1$ convergeert (63) dus. Uit (63) kan (64) afgeleid worden, waaruit blijkt dat er een bovengrens is voor a .

$$-2 < b\{aC_1 \frac{x}{V} - 1\} < 0 \quad (64)$$

geschetste procedure geldt van element tot element, zodat ook verkleining van de elementlengte bij te grote a uitkomst kan brengen.

Nog weer complexer, maar in principe niet verschillend, wordt de situatie als de niet lineariteit is veroorzaakt door toestandsvariabelen, die het gevolg zijn van de te modelleren grootte. Te denken valt hierbij aan een algengroei welke afhankelijk is van het nutriëntenaanbod en een nutriëntenaanbod welke afhankelijk is van de mate van algengroei.

5 Modelinvoer en -resultaat

5.1 Benodigde invoer

Het programma MODQUAL heeft één invoer-dataset nodig, die ingelezen wordt via FORTRAN-dataset reference unit nummer 5. Een volledige invoer-dataset zoals gebruikt voor het project "Waterkwaliteitsmodel Maas" is in bijlage II weergegeven.

Het invoerbestand is in een aantal delen verdeeld die eindigen met een record waarin "ENDTITLE" of "ENDATA" als eerste letters verschijnen, afhankelijk of het titel records of records met gegevens betreft. Per gedeelte zal in de navolgende paragrafen de vereiste computerinvoer besproken worden.

Voor het merendeel van de in te lezen variabelen geldt dat de gebruiker zelf het format opgeeft waarin dat zal gebeuren. Alleen de volgorde is dan nog van belang, deze is in tabellen weergegeven.

5.1.1 Keuze van opties

In het eerste blok van 16 records worden de verschillende opties gekozen en krijgen enkele variabelen een naam. Door "YES" in de velden 10, 11 en 12 van de records aan te brengen wordt de betreffende, voorgeprogrammeerde stof in het model opgenomen.

Voor de 3 conservatieve stoffen is in de velden 49 t/m 52 een 4-letterige naam in te vullen. CZV komt onder de te modelleren stoffen niet voor. Wanneer echter de eerste conservatieve stof "COD_" genoemd wordt, volgt een CZV-modellering conform paragraaf 4.3.2. Wanneer men het aantal geloosde inwonerekwivalenten wil gebruiken om de zuiveringsgraad van de BZV in het water te bepalen, en daarmee de afbraakcoëfficiënt, zoals vermeld in paragraaf 4.3.2, dan moet de derde conservatieve stof "I.E." heten.

Detritus komt in het lijstje te kiezen stoffen evenmin voor. Deze variabele wordt gemodelleerd door in de velden 49 t/m 52 van het record "TITLE 16" de aanduiding "DET_" op te nemen.

Voor zowel de temperatuur als de algen geldt, dat het invullen van "NO" in de velden 11 en 12 niet inhoudt dat er geen rekening met beide gehouden zal worden. Wanneer temperatuur en/of algen niet gemodelleerd worden blijft het steeds mogelijk hen als randvoorwaarden aan het model op te leggen en ze zo hun invloed te laten uitoefenen, zie paragraaf 5.1.7.

De 19 overige niet-konservatieve stoffen en eventuele wijzigingen in de reak-

tiekinetiek, zijn sterk probleemafhankelijk. Het valt dus te voorzien dat voor verschillende situaties een verschillende configuratie van de niet voorgeprogrammeerde elementen gekozen zal worden. Deze configuratie kan door een geschoold FORTRAN programmeur in het programma ingebracht worden. Middels een aanduiding in deze titelrecords kan dan aangegeven worden of men de configuratie actief wil laten zijn of niet. De configuratie ten behoeve van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn" wordt actief door "XX" te plaatsen in de velden 15 en 16 van het "TITLE 15" record. De configuratie ten behoeve van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Maas" wordt actief door dezelfde aanduiding in het "TITLE 16" record.

Met de aanduidingen "XX" in de velden 11 en 12 van het eerste en tweede titelrecord worden bepaalde uitvoeropties gekozen.

5.1.2 Uitvoerdefinitie en probleemdimensie

De 11 invoerrecords eindigend met het ENDATA1 record definiëren de uitvoer en de dimensies van het probleem. De eerste twee records bevatten het variabele uitvoer-format voor de titels en de gesimuleerde grootheden. Deze laatsten hebben nummers gekregen die in tabel 4 zijn weergegeven.

Het derde en vierde record bepalen de volledigheid van de uitvoer. Het vijfde en zevende record verwijzen naar een optie die in de Verenigde Staten toepassing schijnt te vinden, de vraag met hoeveel water de rivier verdund moet worden opdat ze aan bepaalde kwaliteitseisen voldoet. In Nederland is deze optie niet aktueel.

Het zesde record geeft aan dat met een steady-state versie gewerkt gaat worden. Het is in principe mogelijk om, alles konstant houdend, voor de algen een dagcyclus te modelleren. Verder is het mogelijk om onder gelijkblijvend hydraulisch regime een plotselinge lozing te modelleren en de verspreiding daarvan. Een modellering bij variërend debiet is in het model echter niet voorzien.

De records 8 t/m 11 geven de probleemdimensies aan zoals het aantal reaches (trajekten) de toegepaste elementlengte, een tijdstap bij dynamische programmering en de eindtijd, verder de tijdstap voor het uitprinten van de resultaten.

Het tweede blok van 6 records eindigend met 'ENDATA1A' geeft enkele procesparameters die over het gehele netwerk konstant zullen zijn. Het betreft hier chemische en biologische eigenschappen en de daglichtlengte.

nr.	Variabele
1	temperatuur
2	zuurstof
3	BZV
4	CZV
5	organisch + partikulair stikstof
6	ammonium
7	nitriet
8	nitraat
9	kjeldahl-stikstof
10	nitriet + nitraat
11	totaal-stikstof
12	ortho-fosfaat
13	partikulair-fosfor
14	totaal-fosfor
15	chlorofyl
16	coliformen
17	1e niet konservatieve stof
18/20	3 conservatieve stoffen
21/27	7 specifieke niet-konservatieve bestanddelen t.b.v. de modellering van de Maas

Tabel 4 Nummering stoffen in het variabele uitvoer-format van MODQUAL

5.1.3 Trajektindeling

In de groep records eindigend met "ENDATA2" wordt de trajektindeling ingelezen. Deze trajektindeling is eigenlijk niet los te zien van de groep records waarin de elementen gedefinieerd worden.

Men deelt het te modelleren netwerk in in trajekten en elementen. De element-lengte, genoemd onder 5.1.2 tezamen met het aantal elementen in een tak, bepaalt de lengte van een tak. Een trajekt kent maximaal 20 elementen. Omdat alle primaire eigenschappen van het systeem per trajekt ingevoerd worden, is het zaak de trajekten zo te kiezen dat de eigenschappen zoals hydraulika,

diepte en stroomsnelheid, en procesparameters, gelijk zijn over een traject. Bij een samenvoeging van een zijrivier met de hoofdstroom is het laatste element vóór de samenvoeging in de hoofdstroom altijd het laatste element van een traject.

Bij de trajectindeling begint men met het bovenstroomse uiteinde en vervolgt dan een stroombaan tot een samenvoeging. Daarna wordt een nieuw bovenstrooms uiteinde gekozen, dat zou ook het element na een splitsing kunnen zijn. Voor de keuze van het element na een splitsing als bovenstrooms uiteinde geldt dat dit het element moet zijn na de laatst voorgekomen splitsing in het netwerk. Wanneer vanuit een zijtak een samenvoeging bereikt wordt moet dit ook de laatst voorgekomen samenvoeging in het netwerk zijn, of een geheel nieuwe samenvoeging, die dan weer de laatst voorgekomene wordt.

In figuur 5 wordt een tweetal voorbeelden gegeven van mogelijke indelingen. Voorbeeld 1 (fig. 5) geeft een beeld van een rivier met een stroomgebied met zijtakken, uitmondend in een delta met splitsingen.

De gekozen volgorde van takken is mogelijk, maar bijvoorbeeld ook:

volgorde 2) 1 . 2 . 5 . 6 . 7 . 4 . 8 . 3 . 9 etc.

3) 1 . 2 . 4 . 5 . 6 . 7 . 8 . 3 . 9 etc.

4) 1 . 2 . 3 . 5 . 6 . 7 . 4 . 8 . 9 . 10 etc.

Niet mogelijk is bijvoorbeeld:

volgorde 5) 6 . 7 . 8 . 3 . 4 . 5 . 9 . 1 . 2 . 10 etc.

Nadat traject 6 is geweest in volgorde 5) verwacht het programma een traject dat daarop aansluit, tak 7 dus. Na een splitsing moet immers in de richting van een stroomlijn doorgegaan worden en na een nieuwe samenvoeging moet eerst het traject volgen dat op die samenvoeging uitkomt.

Voorbeeld 2 geeft een beeld van een netwerk met bijvoorbeeld een aantal kanalen en sloten in een Nederlands polderlandschap. De gekozen volgorde is hier een van de weinige mogelijkheden. Merk op dat na traject 10 eerst traject 11 moet volgen omdat knooppunt c de laatst openstaande splitsing is.

Mocht het niet mogelijk zijn om met deze regels het netwerk in de juiste volgorde te modelleren dan bestaat de mogelijkheid om expliciet per knooppunt op te geven welke takken daarop uitkomen. Als het echter wel mogelijk is het netwerk in de juiste volgorde te plaatsen dan is het model zelf in staat alle

knooppunten juist te bepalen.

De kilometrering die bij de trajektindeling gegeven wordt, wordt ook in de geprintte uitvoer weergegeven. Het is mogelijk bepaalde trajekten van een negatieve kilometrering te voorzien. In het model is dan de optie te kiezen dat elementen met negatieve kilometrages in de uitvoer niet voorkomen. Op zo'n manier zou een uitvoer bijvoorbeeld alleen de meest belangrijke takken kunnen bevatten.

5.1.4 Uitvoer bij meetstations en elementindeling

Een samenstel van trajekten en elementen kan tezamen tot 750 elementen bevatten. In de regel zal het aantal gebruikte elementen in de grootte-orde van enkele honderden liggen. Dit veroorzaakt een zeer lange uitvoer van de modelresultaten, die niet al te overzichtelijk is.

Het is echter mogelijk door de kilometrages van meetpunten in de groep data-records eindigend met "ENDATA3" op te nemen in de volgorde waarin ze ook in de trajektindeling voorkomen, een aparte uitvoer te krijgen van de modelresultaten uitsluitend op de meetpunten.

Het maximum aantal zo op te geven meetstations is 50.

De groep records eindigend met "ENDATA4" wordt gebruikt om de aard van de elementen te definiëren. De hier gebruikte trajekt- of reach-nummers dienen overeen te stemmen met de nummering zoals gebruikt in 5.1.3. Het aantal elementen vermenigvuldigd met de elementlengte dient per trajekt overeen te stemmen met het verschil tussen begin- en eindkilometrage, en de elementen dienen getypeerd te worden door een nummer van 1 tot en met 10 volgens tabel 5.

MODQUAL geeft de splitsingen en samenvoegingen en de elementen een nummer. Het model nummert ook de voorkomende lozingen en onttrekkingen doorlopend.

nr.	Soort element
1	Bovenstrooms uiteinde
2	Normaal element met evt. diffuse toestroming
3	Element in de hoofdstroom boven samenvoeging (bovenstrooms)
4	Element ^{na} van samenvoeging 
5	Benedenstrooms uiteinde
6	Element waarin een lozing plaatsvindt
7	Element van waaruit onttrekking plaatsvindt
8	Element benedenstrooms van een splitsing in de zijtak boven?
9	Element van splitsing 
10	Element waarin zich een stuw bevindt

Tabel 5 Soorten elementen en hun nummering zoals gebruikt in MODQUAL

Dit laatste punt is in zoverre belangrijk dat bij de opgave van de hoeveelheid geloosd materiaal, zoals onder 5.1.11 beschreven, de nummering aangehouden moet worden die korrespondeert met de volgorde waarin elementen 6 en 7 in deze records voorkomen.

5.1.5 Hydraulische, zuurstof- en koolstofprocesgegevens

In de groep records eindigend met "ENDATA5" worden 16 procesgegevens ingelezen. De eerste negen gegevens betreffen de hydraulische eigenschappen van het traject zoals beschreven in paragraaf 4.2.

Dan volgen zeven koëfficiënten die met de BZV en zuurstofhuishouding te maken hebben. In tabel 6 wordt de betekenis in volgorde van voorkomen in het record weergegeven.

5.1.6 Overige procesparameters

Voor de gegevens ingelezen onder 5.1.5 geldt dat waarschijnlijk in mindere mate, maar voor de hier ingelezen procesparameters kan het wel belangrijk zijn, dat de mogelijkheid bestaat een record met parameters voor alle trajecten te laten gelden. Dit gebeurt door de procesparameters aan het (niet bestaande) traject 0.0 toe te schrijven.

nr.	koëfficiënt	dimensie
0	trajektnummer	-
1	koëfficiënt in snelheids-debietrelatie	-
2	exponent in snelheids-debietrelatie	-
3	koëfficiënt in waterdiepte-debietrelatie	-
4	exponent in waterdiepte-debietrelatie	-
5	Mannings ruwheidskoëfficiënt	-
6	helling talud aan een zijde	-
7	helling talud aan andere zijde	-
8	breedte van het bed	m
9	verhang	
11	BZV-afbraak bij 20°C	l/dag
12	BZV-bezinking	m/dag
13	reaeratie optie	-
14	koëfficiënt 1 voor betreffende optie	-
15	koëfficiënt 2 voor betreffende optie	-
16	koëfficiënt 3 voor betreffende optie	-
17	zuurstofgebruik door de bodem	gO ₂ /m ² /dag

Tabel 6 Betekenis en eenheden van variabelen in het "DATA5" blok van MODQUAL

Deze standaardparameters kunnen dan voor enkele trajekten overschreven worden door voor die trajekten een record met andere parameterwaarden in te lezen.

In principe kan de groep "DATA6" records zeer groot worden. Als men voor ieder van de 20 mogelijke niet-konservatieve stoffen een waarde voor ieder van de 4 mogelijke bijbehorende koëfficiënten in wil lezen dan dienen 80 parameters ingelezen te worden. Zo'n specifieke toepassing zal echter zelden voorkomen. Voor de Rijn bestaat deze groep uit twee blokken records, eindigend met "ENDATA6" en "ENDATA6A". Voor de Maas is daar nog een blok eindigend met "ENDATA6B" bijgekomen. Voor standaardtoepassingen zijn echter uitsluitend de parameters van het eerste blok en de tweede en derde parameter van het tweede blok van belang.

In tabel 7 wordt een opsomming gegeven van deze parameters in de volgorde van voorkomen in het record, met de bijbehorende dimensies.

nr.	koëfficiënt	Dimensie
1.0	trajektnummer	-
1.1	afbraak org. + part. N	l/dag
1.2	bezinking org. + part. N	m/dag
1.3	nitrifikatie ammonium	l/dag
1.4	vrijkomen ammonium uit de bodem	gN/m ² /dag
1.5	nitrifikatie nitriet - nitraat	l/dag
1.6	denitrifikatie nitraat	gN/m ² /dag
1.7	vrijkomen ortho-fosfaat uit de bodem	gP/m ² /dag
1.8	adsorptie ortho-fosfaat	l/dag
1.9	bezinking partikulair fosfor	m/dag
1.10	chlorofyl biomassakonversie	-
1.11	valsnelheid algen	m/dag
1.12	sterfte algen	l/dag
1.13	extinktiekoëfficiënt algenbiomassa	l/m/mg.Algen
1.14	fraktie ammoniumkonsumenten onder algen	-
1.15	achtergrondextinktie	l/m
2.0	trajektnummer	-
2.1	afbraaksnelheid coliforme bacteriën	l/dag
2.2	afbraaksnelheid detritus	l/dag
2.3	bezinksnelheid detritus	m/dag

Tabel 7 Betekenis en eenheden van variabelen in het "DATA6" blok van MODQUAL

5.1.7 Beginvoorwaarden

De groep records eindigend met "ENDATA7" betreffen de beginvoorwaarden voor dynamische simulatie. Hier kunnen voor de toestandsvariabelen startwaarden ingevuld worden. Wanneer het lozingspatroon niet in overeenstemming is met de startwaarden, is er blijkbaar een nieuw lozingspatroon opgetreden. Het model berekent nu de gevolgen van dit nieuwe lozingspatroon, bijvoorbeeld een kalamiteuze lozing, tot zich een nieuwe steady-state situatie instelt. Dit alles onder gelijkblijvende overige kondities.

Voor steady-state simulatie is het mogelijk om op deze plaats de waarden in te

vullen van toestandsvariabelen die zelf niet gemodelleerd worden, maar waarvan het effect wel in de berekeningen betrokken moet worden, zoals voor temperatuur en algengehalten het geval kan zijn.

Het is ook mogelijk in dit blok de startwaarden op te nemen van variabelen die iteratief worden gesimuleerd. Wanneer men bijvoorbeeld de algengehalten wel simuleert en men vult als beginvoorwaarde de gemeten gehalten in, dan zal het aantal iteratiestappen om het eindresultaat te berekenen, en daarmee de reken-tijd, gereduceerd kunnen worden.

De volgorde van variabelen is in tabel 8 aangegeven.

nr.	variabele
0	trajektnummer
1	temperatuur
2	zuurstof
3	BZV
4	organisch + partikulair stikstof
5	ammonium
6	nitriet
7	nitraat
8	orhto-fosfaat
9	partikulair fosfor
10	algen
11	coliforme bacteriën
12	eerste conservatieve stof
13	tweede conservatieve stof
14	derde conservatieve stof
15	detritus

Tabel 8 Variabelen en hun volgorde in de beginvoorwaarde records

5.1.8 Diffuse toestroming

De groep records eindigend met "ENDATA8" wordt de diffuse toestroming in de onderscheiden trajekten ingelezen. De opgegeven diffuse toestroming wordt

geleidelijk over de rekenelementen verdeeld. De fysische achtergrond kan bestaan uit grondwater-kwel, oppervlakte-afstroming of zogenaamde "sub-surface" of "interflow". In de praktijk worden hierin echter ook de effecten geaggregeerd die te gedetailleerd zijn om in het model op te nemen. Te denken valt dan aan kleine beekjes, direkte lozingen van enkele woningen. Voor grotere stroomgebieden zullen ook kleinere rivieren en de invloed van dorpen en kleinere steden onder de diffuse bronnen vallen.

De stoffen waarvan het gehalte of de vracht opgegeven moeten worden staan in dezelfde volgorde als voor de beginvoorwaarden (tabel 8). De enige extra informatie bestaat uit een tweetal variabelen voor "temperatuur" en na het trajectnummer. Door de eerste van deze twee als "XX" in te lezen wordt aangegeven dat voor de variabelen een gehalte wordt ingelezen. In alle andere gevallen wordt aangenomen dat alleen voor "temperatuur" en O_2 een gehalte wordt ingelezen en voor de overigen een vracht. Dit laatste kan van belang zijn als men de diffuse toestroming uitdrukt in een vracht per oppervlak, vermenigvuldigd met het afstromingsoppervlak behorend bij betreffende tak.

De tweede toegevoegde variabele betreft het debiet van diffuse toestroming.

5.1.9 Stuwen en splitsingen

De groep records eindigend met "ENDATA9" wordt gebruikt om informatie over stuwen en splitsingen in te lezen. Het aantal stuwen zal doorgaans niet gelijk zijn aan het aantal splitsingen. Dat is geen bezwaar, er wordt een aantal records verwacht wat gelijk is aan het maximum van de twee. De ingelezen variabelen staan weergegeven in tabel 9.

nr.	variabele	dimensie
0	stuw of splitsingsnummer	-
1	stuwhoogte (Gameson)	m
2	beluchttingscoëfficiënt	-
3	debiet bij splitsing	m^3/s

Tabel 9 Stuw in splitsingsvariabelen in MODQUAL

Wanneer geen debiet bij splitsing opgegeven wordt, berekent het programma, bij splitsingen, met behulp van de gekozen weerstandsformule voor waterdiepte en stroomsnelheidsberekening, een splitsingsdebiet zodat de waterhoogte in beide splitsingstakken gelijk is.

In verband met de benaderende waarde van de weerstandsformule ter plaatse kan het dienstig zijn het debiet zelf op te geven.

5.1.10 Bovenstroomse uiteinden

In de groep "DATA10" records worden de vrachten en/of gehalten aan bovenstroomse randvoorwaarden ingevoerd op dezelfde wijze als de diffuse toestroming welke in paragraaf 5.1.8 behandeld werd.

5.1.11 Lozingen en onttrekkingen

Hiervoor geldt hetzelfde als het gestelde in de paragrafen 5.1.8 en 5.1.10. Deze groep records wordt afgesloten met een "ENDATA11" record.

Het is mogelijk nu nog een drietal groepen records toe te voegen voor diffuse toestroming, bovenstroomse randvoorwaarden en lozingen en onttrekkingen. De dan opgegeven waarden worden uiteindelijk opgeteld bij de eerder ingevoerde waarden. Voor wat betreft temperatuur en zuurstof wordt een debiet-gewogen gemiddeld gehalte berekend. Deze optie heeft betekenis wanneer men de betreffende toestromingen in twee delen wil splitsen, waarvan één zich voor een reeks simulaties bijvoorbeeld als konstante gedraagt, en de ander per simulatie verschilt. Het is op deze wijze ook mogelijk zowel een lozingsgehalte met debiet van bijvoorbeeld grondwatertoestroming, als een vracht van bijvoorbeeld een diffuse nutriëntbelasting per hectare, in het model op te nemen.

5.2 Modeluitvoer

Er bestaan verschillende vormen modeluitvoer. De invoer dataset kan bij iedere simulatie afgedrukt worden, zodat verwarring over de gebruikte parameters uitgesloten is. Deze uitvoer kan ook onderdrukt worden door het eerste record uit de groep "DATA1"-records niet met "LIST" te laten beginnen.

Dan kan een "summary" per stof afgedrukt worden, waarbij de gemodelleerde gehalten voor iedere stof, per element achter elkaar geplaatst worden. Deze optie heeft vooral betekenis bij een dynamische versie van het model, waarbij per afdruk-tijdstap zo'n summary geproduceerd kan worden. Deze optie kan onderdrukt worden door het record volgend op het bovengenoemde "LIST"-record, niet te laten beginnen met "WRITE".

Dan wordt de modeluitvoer zelf afgedrukt. Op één regel staan achterelkaar het absolute elementnummer; het trajectnummer; het elementnummer binnen het traject; de kilometrage van het element; het debiet en de toe- respectievelijk afname van het debiet in het element. Daarna volgt een selectie van gemodelleerde variabelen. Hiertoe kan een voorgeprogrammeerde uitvoeroptie worden gebruikt. Door in het tweede record "XX" op te nemen in de velden 11 en 12, zoals beschreven in 5.1.1, kan echter ook met een variabel uitvoerformat gewerkt worden.

Vervolgens is het nog mogelijk op procesparameters, welke afhangen van niet-lineaire kinetiek en binnen een traject kunnen verschillen door modelberekeningen zelf, in een uitvoer af te drukken. Gedacht kan hierbij worden aan de resulterende algengroei inclusief zelfoverschaduwing etc.. Deze uitvoer wordt onderdrukt door "XX" te plaatsen in de velden 11 en 12 van het eerste titelrecord.

Naast de bovengenoemde afgedrukte modeluitvoer worden nog twee uitvoer-datasets gegenereerd. De eerste is de uitvoer van gesimuleerde waarden op een geselecteerd aantal plaatsen, zoals onder 5.1.4 beschreven. De tweede dataset betreft de modelresultaten in een voor plotprogrammatuur geschikte vorm.

In bijlage III, IV en V zijn voorbeelden van deze uitvoer weergegeven.

6 Computerimplementatie

6.1 Programma-eigenschappen

Het computerprogramma van het model is geschreven in standaard FORTRAN. Er is echter een aantal opties gebruikt die wellicht niet op iedere computer in dezelfde vorm geïmplementeerd zijn. De belangrijkste worden hier genoemd.

Bij het inlezen van het invoerbestand wordt gebruik gemaakt van het zogenaamde "object time format". Dit wil zeggen dat het format (de regelindeling) van de in te lezen regels door de gebruiker in het invoerbestand opgegeven kan worden. Het voordeel van deze optie is dat de gebruiker zijn eigen regelindeling binnen het invoerbestand kan kiezen. De regellengte kan derhalve willekeurig gekozen worden en hoeft niet tot de 80 kolommen van ponskaart of beeldscherm-breedte beperkt te blijven.

Verder ontstaat bij aanwezigheid van dispersie bij de invertering van de matrix zogenaamde "underflow". De stroomopwaartse invloed van de menging in het netwerk dempt uit tot zeer kleine waarden die tot beneden de machinenauwkeurigheid komen. Hiervoor mag 0 ingevuld worden maar vaak wordt tegelijkertijd ook een foutmelding geproduceerd, welke afhankelijk van de specificaties van het systeem onderdrukt zal moeten worden.

Het programma bevat ruim 3000 statements inclusief deklaraties en commentaar. Het is onderverdeeld in een hoofdprogramma en 28 subroutines. De vertaalde kode neemt 157 Kbyte in beslag. Inclusief utilities en geheugenruimte voor de common blocks is ruim 1 Megabyte nodig op een IBM 4331.

Een enkele steady-state simulatie met ca. 300 rekenelementen en 20 stoffen neemt zonder dispersie ongeveer 60 CPU-sekonden en met dispersie ongeveer 100 CPU-sekonden op een IBM 4331. De kosten bedragen dan ca. f 10,— per run.

Omdat de voor- en nabewerking het leeuwendeel van de rekentijd uitmaken mogen bij een unsteady lozingssituatie of bij de modellering van dagelijkse zuurstofvariaties, per tijdstap aanzienlijk geringere kosten verwacht worden.

6.2 Modulaire opbouw

In figuur 6 is het modulaire schema van het computerprogramma weergegeven. Hierin zijn drie fasen te onderscheiden.

- 1) inlezen van gegevens
- 2) doen van modelberekeningen

3) afdrukken van de modelresultaten.

Het inlezen geschiedt slechts een keer. Bij dynamische simulatie van een variatie in het lozingsregime zou dus alleen de overgang van de oude situatie naar één nieuwe situatie gemodelleerd kunnen worden. Het is echter eenvoudig mogelijk het programma zo te veranderen dat een fluktuierend lozingsregime gemodelleerd wordt. Modelleren bij variërend debiet is zonder drastische ingrepen niet mogelijk, of het programma zou gekoppeld moeten worden aan een programmapakket of data-base van waaruit de transporttermen, dispersies, waterdiepten en stroomsnelheden betrokken kunnen worden.

Na het inlezen volgen de modelberekeningen. De hydraulische berekeningen worden ook éénmaal uitgevoerd. Daarna volgen de berekeningen ten behoeve van de konstituenten. Wanneer de volgorde van tabel 10 aangehouden wordt zijn niet-lineariteiten ten gevolge van mutuele interacties zonder problemen op te vangen.

rangorde	te simuleren grootheid
1	konserveratieve stoffen
2	algen
3	niet-konserveratieve stoffen
4	ortho-fosfaat
5	partikulair fosfor
6	BZV
7	organisch + partikulair stikstof
8	ammonium
9	nitriet
10	nitraat
11	zuurstof
12	coliforme bacteriën

Tabel 10 Rangorde van simulatie in MODQUAL

De randvoorwaarden zijn immers dat de vier stikstofcomponenten in volgorde van opklimmende afbraak en oxidatie worden gemodelleerd. Verder dienen BZV en

organisch + partikulair stikstof na partikulair fosfor te worden gemodelleerd, de algen vóór de niet-konservatieve stoffen en die weer vóór het ortho-fosfaat. Zuurstof dient na BZV, nitraat en algen te worden gemodelleerd en de conservatieve stoffen vóór BZV. De enige vrijheidsgraden die nog optreden zijn dan de plaats van BZV, tussen partikulair fosfor en zuurstof in; de plaats van conservatieve stoffen, vóór BZV; en de coliforme bacteriën die geen gebonden plaats hebben.

In verband met niet-lineariteiten van de reaktieterm in de te modelleren variabele zelf, vindt bij algenmodellering en bij BZV-modellering iteratie plaats. Wanneer de groei van algen afhankelijk wordt van de gehalten stikstof en fosfaat, zal iteratie plaats moeten hebben over de gehele groep variabelen 2 t/m 10.

De modellering van de gehalten kent drie stappen:

1. Het initialiseren van matrix-elementen met de transportgegevens.
2. Het modificeren van matrix-elementen met belastingen en reakties.
3. Het oplossen van vergelijking (56) of (57) door matrix-inversie.

De eerste stap geschiedt éénmaal voor alle te modelleren konstituenten, omdat het transport in het systeem voor alle variabelen gelijk is. De tweede stap vindt plaats in aparte subroutines per konstituent. Voor de derde stap is een algemene subroutine aanwezig, die voor iedere simulatie doorlopen wordt.

6.3 Beschrijving van de modulen

- Hoofdprogramma.

Het hoofdprogramma roept achtereenvolgens de inlees-subroutine INDATA, de simulatie-subroutines en de afdruk-subroutines aan. Verder zijn de iteratieschema's en afbreekcriteria in het hoofdprogramma ondergebracht, alsmede de konversie en voorbewerking van een aantal modelkonstanten.

- INDATA

wordt aangeroepen door: MODQUAL

maakt gebruik van : GETIN.

Leest alle invoergegevens in; konverteert belastingen van gehalten in vrachten; konverteert alle grootheden in een gelijk eenhedenstelsel; vult geheugenplaatsen met informatie waaruit de netwerkstructuur en de gekozen opties blijken.

Na deze routine worden er in principe geen gegevens meer ingelezen.

- GETIN

wordt aangeroepen door: INDATA.

Leest groepen records in met procesparameters, diffuse toestromingen, lozingen etc.

- HYDRAU

wordt aangeroepen door: MODQUAL

maakt gebruik van : CHANL.

Bepaalt per element het uittredend debiet, verkrijgt van CHANL bijbehorende stroomsnelheid en waterdiepte, bepaalt de dispersiecoëfficiënt en het elementvolume.

- CHANL

wordt aangeroepen door: HYDRAU.

Berekent afhankelijk van de gekozen optie de waterdiepte en de stroomsnelheid per element.

- TRIMAT

wordt aangeroepen door: MODQUAL.

Vult de array met diagonaalelementen en de array's met de eerste onder-subdiagonaal en de eerste boven-subdiagonaal met coëfficiënten uit de transportvergelijking; vult de array met niet tridiagonale elementen bij samenvoegingen en splitsingen.

- CONSVT; ALGAES; ACONSV; PO4S; PPARTS; BODS; ORGNS; NH3S; NO2S; NO3S; DOS; COLIS

worden aangeroepen door: MODQUAL.

Modificeren de diagonaalelementen met termen van de reaktiekinetiek; stellen de lozingsvector samen uit lozingen en invloed van eerder berekende variabelen.

- REAERC

wordt aangeroepen door: MODQUAL.

Berekent de reaeratiecoëfficiënten ten behoeve van DOS, afhankelijk van de gekozen reaeratie-optie.

- SOVMAT

wordt aangeroepen door: MODQUAL.

Inverteert voor iedere gemodelleerde grootheid de matrix die het stelsel vergelijkingen beschrijft, met een gemodificeerde Gaussische eliminatiemethode.

- WRPT2

wordt aangeroepen door: MODQUAL.

Drukt de modeluitkomst per variabele in rijvorm af. Deze verkorte vorm van

afdrukken kan gebruikt worden om ruimte te besparen bij dynamische simulatie.

- WRPT3

wordt aangeroepen door: MODQUAL.

Drukt de modeluitkomst per variabele in kolomvorm per element af. Dit gebeurt aan het eind van de steady-state simulatie of aan het eind van een aantal dynamische simulaties.

7 Kalibratie, verifikatie en toepassingen

De modelleringsprocedure valt in vier onderdelen uiteen (fig. 7), systeemidentifikatie de kalibratie, de verifikatie en de toepassingen.

Tijdens de systeemidentifikatie wordt het model opgezet. Het is hierbij belangrijk dat er zoveel klaarheid over de beoogde toepassingen bestaat dat een modelopzet gekozen kan worden welke potentieel voorspellend kan werken ten aanzien van deze toepassingen.

De volgende stap is de kalibratie. Daaronder wordt verstaan, het kiezen van de parameters van de betreffende processen, binnen een range waarin deze waarschijnlijk zullen liggen. Bij deze keuze tracht men het concentratieverloop, gedurende de zogenaamde kalibratieperioden, zo goed mogelijk te beschrijven. Wanneer het model naar bevrediging is ingeregeld wordt voor een afzonderlijke periode, met een afzonderlijke set gegevens, die niet tijdens de kalibratie gebruikt zijn, een voorspelling gedaan. Dit is de verifikatiestap. Mocht de voorspelling voor de verifikatieperiode redelijk overeenstemmen met de waarnemingen, dan kan men vertrouwen hebben in het model als voorspellend instrument voor soortgelijke situaties als waarvoor het model is gekalibreerd en geverifieerd. Hoe talrijker en diverser de verifikaties hoe groter het vertrouwen. Wanneer de verifikatie onbevredigend verloopt dient naar de reden van de afwijkingen gezocht te worden. Deze zogenaamde residuenanalyse kan aan het licht brengen dat sommige processen anders gemodelleerd hadden moeten worden. De gegevensverzameling waarop geverifieerd was is nu aan het kalibratiebestand toegevoegd en een nieuwe, onafhankelijke set gegevens is nu nodig ter verifikatie.

Een gekalibreerd en geverifieerd model kan voor voorspellingen gebruikt worden. Een probleem hierbij is doorgaans dat men het resultaat van beleidsmaatregelen wil voorspellen. Dat wil zeggen dat men voor een andere situatie wil voorspellen dan de situatie waarvoor het model gekalibreerd en geverifieerd is. Dit houdt in dat de afwijkingen tussen voorspelling en werkelijkheid dan mogelijk groter is dan voor de verifikatieperioden. Hoe diverser echter de kalibratie en verifikatieperioden, hoe waarschijnlijker het zal zijn dat de afwijking tussen de voorspelling van de gevolgen van maatregelen en de gevolgen zelf, in dezelfde grootte-orde als die van de verifikatie liggen.

In de volgende paragrafen zal op de kalibratie en verifikatie ingegaan worden en worden enige toepassingen genoemd.

7.1 Kalibratie en verifikatie

De aspecten verbonden aan kalibratie en verifikatie zijn onderverdeeld in die van de juiste keuze van de geometrische indeling, de steady-state perioden en de relevante lozingen en processen. Met name in het laatste deel worden adviezen gegeven met betrekking tot de volgorde waarin processen gekalibreerd kunnen worden om tot resultaten te komen.

7.1.1 Geometrische indeling

Ten einde een stroomgebied te modelleren dient een schematisering van het stroomgebied gemaakt te worden. Deze zal in belangrijke mate afhangen van het doel van de modeltoepassing en de informatie over het stroomgebied.

In principe geldt dat ieder proces of iedere ingreep, waarvan men de gevolgen op de waterkwaliteit wil kunnen simuleren, expliciet in het model opgenomen dient te worden. Wanneer men ingrepen in debiet, verblijftijd, lozingen, diffuse belastingen of temperatuur van zijrivieren ook in de voorspelling wil betrekken dient de zijrivier zelf ook in het model opgenomen te worden.

Het is mogelijk dat over een zijrivier vrijwel alleen debiet en gehalten bij samenkomst met de hoofdstroom bekend zijn, of dat de lozingen zich in de buurt van de monding bevinden. In dat soort gevallen kan een zijrivier als puntlozing in het model worden opgenomen.

Een en ander zal ook afhangen van de mate waarin de betreffende zijrivier de uiteindelijke voorspelling beïnvloedt. Men kan zich door de keuze, wat nog wel en wat niet meer afzonderlijk te modelleren, laten leiden door de relatieve grootte van het betreffend debiet, beter nog is het zich te laten leiden door de grootte van de relatieve vracht.

Men moet zich bij het modelleren van riviersystemen rekenschap geven van de accumulatie van onnauwkeurigheden. Wanneer een deel van het gemodelleerde systeem, door gebrekkige informatie, of andere redenen, zich in het model anders gedraagt dan in de werkelijkheid, zullen ook de delen die wel juist in model gebracht zijn beïnvloed worden en mogelijk afwijkende resultaten vertonen.

Voor wat betreft de bepaling van de elementgrootte kan de snelheid van processen een richtlijn zijn. Bij een looptijd per element van Δt en een reactievergelijking $\frac{dC}{dt} = -kC$, treedt door de gebruikte oplossingstechniek een benadering op van de exakte oplossing $C = C_0 \exp(-k\Delta t)$ met $C = C_0(1-k\Delta t)$. De fout ligt dan in de grootte-orde wanneer Bij een gemiddelde BZV-af-

braak van 0,25/dag ontstaat bij een looptijd van 0,1 dag/element een relatieve fout per element van 0,3 ‰. Bij een systeem van 100 elementen akkumuleert dit tot ca. 3% wanneer geen verdere dempende factoren aanwezig zijn. Dempende faktor voor ammonium is bijvoorbeeld dat weliswaar een relatief te grote hoeveelheid van enkele procenten nitrificeert, maar dat er ook relatief te veel ammonium uit organisch stikstof gevormd wordt, zodat de resulterende fout een grootte-orde lager uit zal vallen.

Wanneer de elementgrootte is bepaald, is ook duidelijk welke elementen samengevoegd kunnen worden tot een traject met ongeveer gelijke eigenschappen. Omdat de procesparameters meestal dezelfde waarde over grotere delen van het stroomgebied zullen hebben, wordt de trajectindeling begrensd door de hydrologische eigenschappen, zoals breedte van de bedding, steilte van de oevers e.d.. Bij grotere elementen zal de behoefte aan detail zijn weerslag vinden in een kleiner aantal elementen per tak. Waterdiepte en stroomsnelheid, afhankelijk van het debiet, zijn hier bepalende factoren.

7.1.2 Steady-state perioden

Het model modelleert bij steady-state debieten. Dit wil zeggen dat overal in het model gewerkt wordt met enkelvoudige debietcijfers en gehalten die geldig geacht worden voor de gehele periode die gesimuleerd wordt. In werkelijkheid gebeuren er echter andere dingen.

Stel een fabriek loost met een konstante vracht F in een rivier met wisselend debiet Q . De concentratieverhoging die het gevolg is van deze lozing bedraagt op tijdstip i : F/Q_i . De gemiddelde concentratieverhoging voor het tijdsinterval $t_2 - t_1$ is dan met (65) te geven.

$$\Delta C = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \frac{F}{Q(t)} dt \quad (65)$$

Dit is doorgaans niet gelijk aan (66).

$$\Delta C = F \cdot \frac{t_2 - t_1}{\int_{t_1}^{t_2} Q(t) dt} \quad (66)$$

Het model werkt met (66), de praktijk met (65). Wanneer het debiet Q niet te veel fluktueert is het verschil niet groot. Enige verbetering zou verkregen kunnen worden door het gehele model in vrachten te laten rekenen en de modeluitkomsten ook te vergelijken met de gemiddeld gemeten vrachten bij de meetstations.

Aangezien alle processen afhankelijk zijn van gehalten en looptijd is deze verbetering beperkt, om tot gehalten te komen moet immers weer door het gemiddeld debiet gedeeld worden, waarmee bedoelde fout opnieuw is geïntroduceerd. In een afzonderlijke studie [17] is aangetoond dat voor afbraakprocessen de invloed van de fout gemaakt door steady-state benadering van niet stationaire processen afneemt langs de lengterichting van de rivier, terwijl bij groeiprocessen een toename optreedt.

Een aparte kwestie is nog dat bij sterk wisselende debieten niet alleen de gehalten sterk fluktuëren, maar doorgaans ook de vrachten, zij het minder. Wordt voor de simulatie dan ook een periode gekozen met sterk wisselend debiet, dan is het niet uitgesloten dat de spreiding in de gemeten waarden dermate groot is dat een vergelijk van de modeluitkomsten hiermee moeilijk wordt. In die gevallen verdient keuze van een periode met ongeveer gelijk debiet de voorkeur.

De keuze van de simulatieperiode wordt verder nog bepaald door de looptijd in het beschouwde rivierstelsel. Wanneer de simulatieperiode niet een voldoende aantal malen de looptijd bedraagt, dient rekening gehouden te worden met deze looptijd zowel voor wat betreft de lozingen en onttrekkingen in het stelsel als voor wat betreft de selectie van kalibratie en verifikatiewaarnemingen langs het stelsel.

7.1.3 Lozingen en processen

Na een juiste geometrische indeling en de keuze van de simulatieperiode verdient het aanbeveling eerst de waterbalans sluitend te krijgen. Daartoe worden alle bekende debieten ingevoerd, tezamen met de vrachten of gehalten aan conservatieve stoffen als chloride, fluoride en tritium. Van deze stoffen dienen ook alle eventuele lozingen in het model opgenomen te worden. Van een aantal conservatieve stoffen is bekend wat het gehalte is in regenwater, in sub-surface flow en in grondwater. Hiermee kan dan de diffuse toestroming nader gekalibreerd worden.

Het gehalte aan fluoride in grond- en regenwater mag doorgaans verwaarloosd worden. Dit geeft twee manieren om de kwantiteit van diffuse toestroming te

kalibreren. Enerzijds dient er voldoende diffuus toe te stromen om het benedenstroomse debiet te verkrijgen, anderzijds dient de verdunning van het fluoridegehalte voldoende te zijn en als derde mechanisme dient de diffuse toestroming uitgedrukt in mm per afstromend oppervlak per jaar in redelijke verhouding te staan tot regenval en verdamping ter plaatse.

Een onderverdeling naar afstroming door de bovenste bodemlaag en grondwater-toestroming kan eventueel gemaakt worden met een tritiumsimulatie, in de wetenschap dat het tritiumgehalte in grondwater ca. 10 à 15 pCi/l bevat en in regenwater ca. 200 pCi/l aangetroffen wordt. Deze onderverdeling is ook mogelijk wanneer redelijke schattingen van het chloridegehalte in beide frakties ter beschikking staan.

Wanneer een gehalte in diffuse toestromingen is geschat voor de gemodelleerde grootheden en wanneer de lozingen in het invoerbestand zijn opgenomen, is het in principe mogelijk een simulatie, zonder de invloed van processen, uit te voeren. Het verschil tussen de berekende en de gemeten waarden bestaat uit de invloed van processen, het deel dat door het model verklaard zou moeten worden.

Op dit punt aangeland is het belangrijk om te weten hoe groot de invloed van algen is in de rivier. Om dit te schatten neemt men het gemeten algengehalte en vermenigvuldigt dit met de konversiefactoren naar stikstof, fosfor en zuurstof. Het is dan duidelijk of de algen een substantieel aandeel in het organisch stikstof, particulier fosfor of het BZV vormen. Om het reële belang voor wat betreft nutriëntopname te schatten, vermenigvuldigt men de boven verkregen particulaire gehalten met een typische opnamesnelheid als 0,5 of 1,0 maal het eigengewicht per dag bij 20°C. Dan deelt men de gevonden waarde door het in de rivier gemeten gehalte ammonium of nitraat, ortho-fosfaat en zuurstof en men vindt de grootte van de eerste orde konstante waarmee het algenproces ongeveer gelijkwaardig is. Is dit een niet te veronachtzamen bijdrage dan bemoeilijkt dat de kalibratie.

Voor het geval de algen onbelangrijk zijn kan men het gedrag van ortho-fosfaat als eerste kalibreren omdat daar dan alleen de adsorptie een rol speelt (het vrijkomen uit de bodem wordt vooralsnog veronachtzaamd). Hierna is het particulier P te kalibreren met als enige konstante de bezinksnelheid. Wanneer de bezinksnelheid van BZV nu in redelijke verhouding tot die van particulier P gekozen wordt kan de afbraaksnelheid van BZV gekalibreerd worden. Voor de afbraaksnelheid van BZV zijn verschillende formuleringen in omloop, die allen toch niet te ver uiteenlopen. Men kan dan ook omgekeerd een redelijke afbraak-

snelheid invoeren en de bezinksnelheid kalibreren. Mochten de diverse snelheden afwijken van de te verwachten waarden dan is het noodzakelijk de redenen te onderzoeken.

Zonder sedimentatie kan men in eerste instantie het organisch + particulier N modelleren omdat het aan zand en klei gebonden stikstof doorgaans geen groot deel van deze hoeveelheid uitmaakt. De afbraak van organisch stikstof naar ammonium dient enige relatie te hebben tot de BZV-afbraak, tenzij de verhouding stikstof-koolstof sterk afwijkt van die in organisch materiaal.

Zonder vrijkomen van ammonium uit de bodem kalibreert men dan de nitrifikatie en denitrifikatie. Hierna dient men ervan bewust te zijn dat een gelijk resultaat verkregen wordt met een vrijkomen van $x \text{ gN/m}^2/\text{dag}$ als ammonium uit de bodem en een extra denitrifikatie van $x \text{ gN/m}^2/\text{dag}$ tezamen met een hogere nitrifikatiesnelheid.

Het bodemverbruik van zuurstof kiest men aan de lage kant in eerste instantie en men beziet het verloop van het zuurstofgehalte. Het versnellen van de nitrifikatiecyclus door vrijkoming van ammonium uit de bodem moet gepaard gaan aan een hoger zuurstofverbruik van de bodem en zal dus op twee manieren tot een verlaging van het zuurstofgehalte aanleiding geven. Het laten bezinken van organisch stikstof is de enige manier om de nitrifikatiesnelheid te laten verminderen en meer zuurstof in oplossing te houden door bijstelling van de stikstofcyclus. Meer BZV laten bezinken en minder laten afbreken is de bijstelbaarheid voor het BZV.

Er zitten dus nogal wat vrijheidsgraden in het kalibratieproces. Deze zijn mede in te perken door nog enige andere kalibratieperioden te kiezen. Een periode met andere temperatuur doet vrijwel alle processen veranderen, behalve bezinking en adsorptie van ortho-fosfaat. Verder zal een kalibratieperiode met duidelijk andere gehalten juist alle proportionele effecten doen wijzigen dus eerste orde processen en bezinkingen, ten opzichte van de konstant gebleven bodemprocessen.

Als algen een wel belangrijke rol spelen kan men als eerste stap de algengroei modelleren. Wanneer de nutriëntgehalten hoog genoeg zijn zal alleen lichtlimiting optreden. De eigen extinktie van algen is wel ongeveer te stellen op $0,02 \text{ à } 0,03 \text{ m}^3/\text{mg Chl/m}$, een achtergrondextinktie is wellicht uit secchidiepten tezamen met het chlorofyl te halen. Wanneer K_1 uit (46) nu op ca. 3,0 wordt geschat, blijven de temperatuurs- (en eventueel daglichtlengte) afhankelijke maximale groeisnelheid, de respiratie, de sedimentatie en de sterfte over als kalibratiegrootheden. Hoewel er zo nogal wat kalibratiekonstanten

overblijven zijn wel enige richtwaarden te geven, zoals een maximale groei van ca. 1/dag bij 20°C, een respiratie van 0,1/dag (10% van de maximale groei) en een sedimentatie van enkele tientallen centimeters per dag.

Het kan voor de kalibratie van belang zijn te weten of een lichtgelimiteerde evenwichtssituatie ontstaat. Bij verschillen in waterdiepte zal deze evenwichtssituatie ook verlopen. Op deze wijze is enig inzicht te krijgen in de verhouding van groei minus bezinking (beide afhankelijk van de waterdiepte) ten opzichte van respiratie en sterfte (daarvan onafhankelijk). Hogere groei met hogere sterfte kan tezamen een ongeveer eender resultaat hebben als een lagere groei en lagere sterfte. Men moet zich dan echter realiseren dat de bezinking van het afgestorven materiaal slechts iets hoger dan dat van algen zal zijn en de gehalten afgestorven algen op enkele tientallen procenten van de levende algenpool gesteld mogen worden.

Hieruit vloeit een dekompositie in de waterfase van detritus voort, die in redelijke verhouding tot die van BZV en ander organisch materiaal moet staan. Ook hier geldt dat het kalibreren op perioden met verschillende looptijden en waterdiepten, als wel bij verschillende temperaturen, enig inzicht kan verschaffen in de relatieve grootte der factoren.

Het verdient wellicht aanbeveling zowel een relatief hoge groei en sterfte, als een relatief lage groei en sterfte te proberen.

Na deze algenkalibratie kan voortgegaan worden met de kalibratie van de overige factoren zoals eerder besproken.

Het zal in die situaties waarin algen een belangrijke invloed uitoefenen zo uitpakken dat het zuurstofgehalte in belangrijke mate door deze algenkomponent wordt beïnvloed. Het ligt daarom in de lijn der verwachtingen dat bovengenoemde kalibratiecyclus zeker tweemaal doorlopen zal moeten worden.

In tabel 11 wordt een range opgegeven van acceptabele waarden voor de diverse voorgeprogrammeerde parameters in MODQUAL. Zij zijn gedeeltelijk ontleend aan [13].

8 Toepassing van MODQUAL in Nederland

Het model MODQUAL is in Nederland reeds toegepast in 4 studies voor Rijkswaterstaat.

- Waterkwaliteitsmodel Rijn
- Polyfosfaatvervangende stoffen in het stroomgebied van de Rijn
- Waterkwaliteitsmodel Maas
- Waterkwaliteitsmodel Hollands Diep

Voor het Hoogheemraadschap Rijnland zal het model toegepast worden op de kanalen en watergangen in Rijnland. Van de toepassing op Rijn en Maas zullen in dit hoofdstuk enige illustraties volgen.

8.1 Toepassing van MODQUAL op de Rijn

In het kader van het projekt "Waterkwaliteitsmodel Rijn" is het model MODQUAL toegepast op de Rijn vanaf Stein (ca. 30 km benedenstrooms van de Bodensee). De zijrivieren Neckar, Main en Moezel zijn expliciet in het model opgenomen. Van de overige zijrivieren is verondersteld dat de verblijftijd kort genoeg zou zijn om hun effect als een puntlozing te concentreren. In Nederland zijn zowel de IJssel als de Lek en de Waal in het model betrokken.

De gekozen elementlengte bedroeg 10 kilometer, waardoor een model met in totaal 200 rekenelementen ontstond. De volledige modelstructuur (fig. 1) is op dit netwerk toegepast.

Kalibratie vond plaats op het jaargemiddelde beeld van 1973. De gegevens van 1977 werden ter verifikatie gebruikt. Daarnaast zijn nog simulaties voor 1972 en 1974 uitgevoerd onder het lozingsregime van 1973. De keuze van de twee jaren werd voornamelijk bepaald door de aanwezigheid van een inventarisatie van lozingen in deze jaren daar de IRC (Internationale Rijn Commissie).

Hiernaast zijn voor de simulatiejaren nog reeksen van 12 maandsimulaties verricht, die een pseudodynamisch beeld geven.

In de figuren 8, 9, 10 en 11 zijn enkele voorbeelden van deze simulaties weergegeven.

8.2 Toepassing van het model MODQUAL op de Maas

Het model MODQUAL is in het kader van het project "Waterkwaliteitsmodel Maas" toegepast op steady-state situaties in het nederlandse deel van de Maas.

Het traject Eysden-Keizersveer meet ca. 250 km en is in het model ingedeeld in elementen van 1 kilometer lengte. Tesaen met de elementen benodigd voor de parallelle kanalen "Julianakanaal" en "lateraal kanaal" zijn 292 rekenelementen gebruikt.

Geometrisch is de rivier ingedeeld in 32 trajekten en er zijn 7 stuwen in het model opgenomen. De volledige modelstructuur (fig. 1) is toegepast op twee laag-water kalibratieperioden in 1975 en 1978 en twee kalibratieperioden met een wat hoger debiet in dezelfde jaren. Verifikatie vond plaats met gegevens uit 1979 welke betrekking hadden op een periode met hoger en één met lager debiet.

Met behulp van het model worden voorspellingen gedaan van de gevolgen van een groot aantal beheers-scenario's. In de figuren 12, 13 en 14 wordt de simulatie van de stikstofcyclus voor de verifikatieperiode weergegeven.

<u>Parameter</u>	<u>literatuurrange</u>	<u>eenheid</u>
O ₂ opname NH ₃ afbraak	ca. 3,4	g O ₂ /g N
O ₂ opname NO ₂ afbraak	ca. 1,1	g O ₂ /g N
O ₂ produktie algen	80 - 120	g O ₂ / g Chlf
N in algen	4 - 10	g N/g Chlf
P in algen	0,4 - 1,5	g P/g Chlf
Maximale groeisnelheid algen 20 °C *)	1,0 - 3,0	l/dag
Integraal van de lichtcurve	3,0 - 4,0	-
Algen respiratie 20 °C	0,05 - 0,5	l/dag
Algensterftesnelheid 20 °C	0,05 - 0,20	l/dag
Bezinking algen	0,0 - 1,0	m/dag
Achtergrondextinctie	0,5 - 4,0	l/m
Specifieke extinctie	10,0 - 20,0	m ² / g Chlf
Detritus sedimentatie	0,0 - 2,0	m/dag
Detritus afbraak	0,05 - 0,5	l/dag
BOD-afbraak constante 20 °C	0,1 - 0,9	l/dag
BOD-sedimentatie	0,0 - 2,0	m/dag
Bodem respiratie 20 °C	0,5 - 4,0	g O ₂ /m ² /dag
Org.-N afbraak 20 °C	0,05 - 0,5	l/dag
Org.-N sedimentatie	0,0 - 1,0	m/dag
Nitrifikatie eerste trap 20 °C	0,01 - 0,25	l/dag
Nitrifikatie tweede trap 20 °C	0,1 - 2,0	l/dag
Vrijkomen ammonium 20 °C	0,0 - 0,5	g N/m ² /dag
Denitrifikatie 20 °C	0,0 - 2,0	g N/m ² /dag
Bezinksnelheid org+part.P	0,0 - 2,0	m/dag
Adsorptiesnelheid ortho-P 20 °C	0,01 - 1,0	l/dag
Vrijkomen ortho-P 20 °C	0,0 - 0,05	g P/m ² /dag

Tabel 11 Literatuurranges van de in MODQUAL gebruikte parameters

*) Deze groeisnelheid is nog niet gekorrigeerd voor de daglichtlengte

REFERENTIES

1. CHURCHILL, M.A.; ELMORE, H.L.; BUCKINGHAM, R.A.
The prediction of stream reaeration rates.
Journal Sanitary Engineering Division, ASCE, 7, 1962.
2. ELDER, J.W.,
The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow.
Journal Fluid Mechanics, 5, 1959.
3. GAMESON, A.L.H.
Weir and the aeration of rivers.
Journal of the institution of water engineers, 11, 1957.
4. GRENNEY, W.J.; TEUSCHER, M.C.; DIXON, K.S.
Characteristics of the solution algorithms for
the QUAL II river model.
Journal WPCF, 1, 1978.
5. HENDERSON, A.E.
Open channel flow.
Macmillan Co., 1966.
6. HUGTO. R.J.; LOUCKS, D.P.
A multi parameter water quality management model for river basins.
Office of Water Research and Tecnology.
U.S. Department of the Interior, Washington, 1977.
7. LANGBIEN, W.B.; DURUM, W.H.
The aeration capacity of streams.
U.S. Geological Survey Circ., 542, 1967.
8. LYONS, T.C. SCHULZE, K.W.
User oriented stream water quality-ecologic model for
streams and lakes.
Proc. IAHR, B44, 1977. Baden-Baden.

REFERENTIES (vervolg)

9. MASCH, F.D.; and associates.
Simulation of water quality in streams and canals, theory and description of the QUAL-I mathematical modelling system.
Texas Water Development Board, 1971.
10. NCASI
A review of the mathematical water quality model QUAL-II and guidance for its use.
NCASI, technical bulletin 338, 1980.
11. O'CONNOR, D.J.; DOBBINS, W.E.
Mechanism of reaeration in natural streams.
Trans. ASCE, 123, 1958.
12. OWENS, M.; EDWARDS, R.W.; GIBBS, J.W.
Some reaeration studies in streams.
International Journal Air and Water Pollution, 8, 1964.
13. ROESNER, L.A.; GIGUERE, P.R.? EVENSON, D.E.
Computer program documentation for the stream quality model QUAL-II.
Water Resources Engineers, Inc., 1977.
14. THACKSTON, E.L.; KRENKEL, P.A.
Longitudinal Mixing and reaeration in natural streams.
Technical Report 7. Sanitary and Water Resources Engineering, Vanderbilt University, 1966.
15. TRIVOGLOU, E.C.; WALLACE, J.R.
Characterization of stream reaeration capacity prepared for the EPA, office for research and monitoring,
Washington, D.C., 1972.
16. Waterloopkundig Laboratorium.
De toepassing van fysisch-hydraulische schaalmodellen t.b.v. waterkwaliteitsvraagstukken. S375, 1978.

REFERENTIES (vervolg)

17. Waterloopkundig Laboratorium
Een beschouwing over het gebruik van over de tijd gemiddelde vergelijkingen en waarnemingen.
Intern Memo 12, Waterkwaliteitsmodel Rijn, 1978.
18. Water Quality Board for Houston.
Water quality modelling for the 208 designated planning areas.
Galveston Area Council, 1977.

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 Kruif, (vanaf 1-10-80) 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 (secretaris tot 1-7-79)

Projectgroep Waterkwaliteitsmodel Maas

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

samenstelling: ing. R.H.J.M. Brüggemann, secretaris, Rijksinstituut voor
Zuivering van Afvalwater
ing. A.H.J. Dijkzeul, Rijksinstituut voor Zuivering van
Afvalwater
ir. J.M. Goppel, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging
ir. R. Klomp, Waterloopkundig Laboratorium
ing. D.P. Maris, (tot 1-3-79), Directie Limburg
ir. A. van Mazijk, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging
ir. J.A. van Pagee, Waterloopkundig Laboratorium
ir. M.E. Pot, voorzitter, Directie Limburg
ir. L. Postma, (vanaf 1-7-79), Waterloopkundig Laboratorium
ir. B.G.M. van de Wetering, Rijksinstituut voor Zuivering
van Afvalwater

Bijlage II

Voorbeeld van een invoerbestand zoals dat na inlezen uitgeprint wordt

*** DATA LIST STREAM QUALITY ROUTING MODEL ***
*** QUAL-II/ DHL - VERSION ***

\$\$\$ (PROBLEM TITLES) \$\$\$

CARD TYPE		QUAL-I I PROGRAM TITLES	30-10-1975
TITLE001	X	RUN OP BASIS VAN GEVEENS	I-6-1975 TM
TITLE002	YES	WATERKUALITEITSMODEL MAAS (R1483)	
TITLE003	YES	CONSERVATIVE MINERAL II = F	MG/L
TITLE004	YES	CONSERVATIVE MINERAL III= CL	MG/L
TITLE005	NO	TEMPERATURE	
TITLE006	YES	5-DAY BIOCHEMICAL OXYGEN DEMAND IN MG/L	
TITLE007	YES	ALGAE AS CHLOROPHYL A IN MG/L	
TITLE008	YES	PHOSPHORUS AS P IN MG/L	
TITLE009	YES	ORGANIC-N IN MG/L	
TITLE010	YES	AMMONIUM-N IN MG/L	
TITLE011	YES	NITRATE-N IN MG/L	
TITLE012	YES	DISSOLVED OXYGEN IN MG/L	
TITLE013	YES	FECAL COLIFORM (VERVANGEN DOOR LAS, UG/L)	
TITLE014	NO	ARB NONCONSERVATIVE = DET	UG/L
TITLE015	YES		
TITLE016	YES		
TITLE017	XX		
ENDTITLE			

\$\$\$ DATA TYPE 1 (CONTROL DATA) \$\$\$

CARD TYPE	CARD TYPE
CARD TYPE	
1. INITIAL SUMMARY	0.0
2. FLOW STATEMENT	0.0
3. ELECTRICAL COEFFICIENTS	0.0
4. DISTANCE COEFFICIENTS	0.0
5. DISTANCE COEFFICIENTS	0.0
6. NUMBER OF REACHES	32.00000
7. NUMBER OF REACHES	32.00000
8. NUMBER OF REACHES	32.00000
9. NUMBER OF REACHES	32.00000
10. NUMBER OF REACHES	32.00000
11. NUMBER OF REACHES	32.00000
12. NUMBER OF REACHES	32.00000
13. NUMBER OF REACHES	32.00000
14. NUMBER OF REACHES	32.00000
15. NUMBER OF REACHES	32.00000
16. NUMBER OF REACHES	32.00000
17. NUMBER OF REACHES	32.00000
18. NUMBER OF REACHES	32.00000
19. NUMBER OF REACHES	32.00000
20. NUMBER OF REACHES	32.00000
21. NUMBER OF REACHES	32.00000
22. NUMBER OF REACHES	32.00000
23. NUMBER OF REACHES	32.00000
24. NUMBER OF REACHES	32.00000
25. NUMBER OF REACHES	32.00000
26. NUMBER OF REACHES	32.00000
27. NUMBER OF REACHES	32.00000
28. NUMBER OF REACHES	32.00000
29. NUMBER OF REACHES	32.00000
30. NUMBER OF REACHES	32.00000
31. NUMBER OF REACHES	32.00000
32. NUMBER OF REACHES	32.00000
33. NUMBER OF REACHES	32.00000
34. NUMBER OF REACHES	32.00000
35. NUMBER OF REACHES	32.00000
36. NUMBER OF REACHES	32.00000
37. NUMBER OF REACHES	32.00000
38. NUMBER OF REACHES	32.00000
39. NUMBER OF REACHES	32.00000
40. NUMBER OF REACHES	32.00000
41. NUMBER OF REACHES	32.00000
42. NUMBER OF REACHES	32.00000
43. NUMBER OF REACHES	32.00000
44. NUMBER OF REACHES	32.00000
45. NUMBER OF REACHES	32.00000
46. NUMBER OF REACHES	32.00000
47. NUMBER OF REACHES	32.00000
48. NUMBER OF REACHES	32.00000
49. NUMBER OF REACHES	32.00000
50. NUMBER OF REACHES	32.00000
51. NUMBER OF REACHES	32.00000
52. NUMBER OF REACHES	32.00000
53. NUMBER OF REACHES	32.00000
54. NUMBER OF REACHES	32.00000
55. NUMBER OF REACHES	32.00000
56. NUMBER OF REACHES	32.00000
57. NUMBER OF REACHES	32.00000
58. NUMBER OF REACHES	32.00000
59. NUMBER OF REACHES	32.00000
60. NUMBER OF REACHES	32.00000
61. NUMBER OF REACHES	32.00000
62. NUMBER OF REACHES	32.00000
63. NUMBER OF REACHES	32.00000
64. NUMBER OF REACHES	32.00000
65. NUMBER OF REACHES	32.00000
66. NUMBER OF REACHES	32.00000
67. NUMBER OF REACHES	32.00000
68. NUMBER OF REACHES	32.00000
69. NUMBER OF REACHES	32.00000
70. NUMBER OF REACHES	32.00000
71. NUMBER OF REACHES	32.00000
72. NUMBER OF REACHES	32.00000
73. NUMBER OF REACHES	32.00000
74. NUMBER OF REACHES	32.00000
75. NUMBER OF REACHES	32.00000
76. NUMBER OF REACHES	32.00000
77. NUMBER OF REACHES	32.00000
78. NUMBER OF REACHES	32.00000
79. NUMBER OF REACHES	32.00000
80. NUMBER OF REACHES	32.00000
81. NUMBER OF REACHES	32.00000
82. NUMBER OF REACHES	32.00000
83. NUMBER OF REACHES	32.00000
84. NUMBER OF REACHES	32.00000
85. NUMBER OF REACHES	32.00000
86. NUMBER OF REACHES	32.00000
87. NUMBER OF REACHES	32.00000
88. NUMBER OF REACHES	32.00000
89. NUMBER OF REACHES	32.00000
90. NUMBER OF REACHES	32.00000
91. NUMBER OF REACHES	32.00000
92. NUMBER OF REACHES	32.00000
93. NUMBER OF REACHES	32.00000
94. NUMBER OF REACHES	32.00000
95. NUMBER OF REACHES	32.00000
96. NUMBER OF REACHES	32.00000
97. NUMBER OF REACHES	32.00000
98. NUMBER OF REACHES	32.00000
99. NUMBER OF REACHES	32.00000
100. NUMBER OF REACHES	32.00000

\$\$\$ DATA TYPE 1A (ALGAE PRODUCTION AND NITROGEN OXIDATION CONSTANTS) \$\$\$

[illegible]

\$\$\$ DATA TYPE 2 (REACH IDENTIFICATION) \$\$\$

[illegible]

STATIONCODE	NR	KM
DEFAULT	0	0
ESDEN GRENS	1	3
BORGHAREN BOVEN	2	16
MAASEIK	3	61
STEVENSWERT	4	61
BORN JUL. KAN.	5	20
MAASBEEK BOVEN	6	33
LIJNENBOVEN	7	69
RECHTBOVEN	8	84
ROEFELD BOVEN	9	101
MAASEIK BOVEN	10	146
MAASEIK BOVEN	11	175
GRAVE BOVEN	12	201
LITH BOVEN	13	227
HEIJER	14	247

[illegible][illegible]

\$\$\$ DATA TYPE 9 (STREAM WEIRS) AND DEVIATION FLOWS AT SPLITS \$\$\$

LOCATION	NR.	HEIGHT	FACTOR	SPLITFLOW
BORGHAREN	1.0	-99.90	0.55	10.50
LINNE	2.0	-99.90	0.45	10.00
ROERMOND	3.0	-99.90	0.30	3.00
BELFELD	4.0	-99.90	0.35	0.0
SAMBECK	5.0	-99.90	0.40	0.0
GRAVE	6.0	-99.90	0.35	0.0
LITH	7.0	-99.90	0.40	0.0

\$\$\$ DATA TYPE 10 (HEADWATER SOURCES) \$\$\$

LOCATION	NR.	CONC	M3	TEMP	DOSS	BODS	ORGN	NH4+	NO2-	NO3-	PO4P	PPAR	ALGAE	COLI	C
----------	-----	------	----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-------	------	---

EYSDEN GRENS	1.0	XX	48.00	22.60	7.65	3.93	1.36	1.14	0.13	2.30	0.60	0.16	0.02	0.0	0.0
--------------	-----	----	-------	-------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-----	-----

\$\$\$ DATA TYPE 11 (POINT SOURCE / POINT SOURCE CHARACTERISTICS) \$\$\$

LOCATION	NR.	CONC	M3	TEMP	DOSS	BODS	ORGN	NH4+	NO2-	NO3-	PO4P	PPAR	ALGAE	COLI	C
DEFAULT	0.		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
EYSDEN	2.		0.0	0.0	0.0	4.65	0.47	0.53	0.0	0.05	0.12	0.0	0.0	0.0	0.0
MAASTRICHT	5.		0.0	0.0	0.0	37.65	3.97	5.57	0.0	1.26	1.20	0.0	0.0	0.0	0.0
GEULLE	8.		0.0	0.0	0.0	1.37	0.15	0.17	0.0	0.01	1.05	0.0	0.0	0.0	0.0
ELSLOO	9.		0.0	0.0	0.0	2.65	0.07	0.26	0.0	0.03	0.02	0.0	0.0	0.0	0.0
OBBICT	11.		0.0	0.0	0.0	2.55	0.27	0.22	0.0	0.01	0.06	0.0	0.0	0.0	0.0
GREUVENB.	12.		0.0	0.0	0.0	1.74	0.19	0.10	0.0	0.0	0.03	0.0	0.0	0.0	0.0
ROOSTEREN	13.		0.0	0.0	0.0	0.81	0.09	0.16	0.0	0.0	0.04	0.0	0.0	0.0	0.0
STEVENS.	14.		0.0	0.0	0.0	0.80	0.13	0.36	0.0	0.01	0.03	0.0	0.0	0.0	0.0
WESSEM	15.		0.0	0.0	0.0	1.30	0.97	1.19	0.0	0.51	0.19	0.0	0.0	0.0	0.0
MAASBRACHT	18.		0.0	0.0	0.0	1.86	0.12	0.19	0.0	0.09	0.10	0.0	0.0	0.0	0.0
HERTEN	20.		0.0	0.0	0.0	1.68	0.06	0.25	0.0	0.02	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
ROERMOND	22.		0.0	0.0	0.0	0.62	0.21	0.27	0.0	0.02	0.02	0.0	0.0	0.0	0.0
HORN	23.		0.0	0.0	0.0	0.60	0.15	0.18	0.0	0.0	0.08	0.0	0.0	0.0	0.0
HAELLEN	24.		0.0	0.0	0.0	1.44	0.22	1.53	0.0	0.1	0.05	0.0	0.0	0.0	0.0
KESSEL	27.		0.0	0.0	0.0	12.54	6.50	8.54	0.0	2.16	1.61	0.0	0.0	0.0	0.0
BELFELD	28.		0.0	0.0	0.0	72.05	1.28	1.60	0.0	0.61	0.22	0.0	0.0	0.0	0.0
TEGELLEN	29.		0.0	0.0	0.0	14.06	0.08	0.30	0.0	0.20	0.02	0.0	0.0	0.0	0.0
VENLO	30.		0.0	0.0	0.0	2.07	0.41	0.51	0.0	0.05	0.12	0.0	0.0	0.0	0.0
GRUBBENV.	31.		0.0	0.0	0.0	0.37	0.04	0.08	0.0	0.0	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
ARCBEN & V	32.		0.0	0.0	0.0	0.62	0.07	0.11	0.0	0.0	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
BROEKHUIZ	33.		0.0	0.0	0.0	0.76	0.18	0.38	0.0	0.11	0.05	0.0	0.0	0.0	0.0
MEERLO-W.	34.		0.0	0.0	0.0	0.07	0.04	0.05	0.0	0.0	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
BERGEN	35.		0.0	0.0	0.0	0.37	0.04	0.08	0.0	0.0	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
VOERLINGSB	36.		0.0	0.0	0.0	0.62	0.18	0.38	0.0	0.11	0.05	0.0	0.0	0.0	0.0
BOXMEER	37.		0.0	0.0	0.0	17.11	1.88	2.20	0.0	0.01	0.02	0.0	0.0	0.0	0.0
GENNEP	38.		0.0	0.0	0.0	37.18	3.07	4.23	0.0	0.4	0.13	0.0	0.0	0.0	0.0
CUYK	40.		0.0	0.0	0.0	4.18	0.38	0.50	0.0	0.11	0.05	0.0	0.0	0.0	0.0
MOOK & M.	41.		0.0	0.0	0.0	1.47	0.16	0.19	0.0	0.01	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
RAVENSTEIN	42.		0.0	0.0	0.0	1.15	0.17	0.22	0.0	0.01	0.04	0.0	0.0	0.0	0.0
MEGEN H.M.	43.		0.0	0.0	0.0	1.62	0.08	0.15	0.0	0.01	0.05	0.0	0.0	0.0	0.0
LITH	44.		0.0	0.0	0.0	1.13	0.17	0.20	0.0	0.01	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
EMPEL	45.		0.0	0.0	0.0	1.13	0.08	0.15	0.0	0.01	0.01	0.0	0.0	0.0	0.0
VOER	1.		0.20	0.0	0.0	8.50	0.04	0.36	0.0	3.67	1.95	0.0	0.0	0.0	0.0
TERNAAYEN	3.		4.30	0.0	0.0	0.90	0.80	3.00	0.0	2.74	1.10	0.0	0.0	0.0	0.0
LEUKER	4.		1.80	0.0	0.0	0.0	1.32	0.65	0.0	2.40	1.80	0.0	0.0	0.0	0.0
WILLEMST.	6.		-14.60	0.0	0.0	0.0	1.00	0.30	0.0	1.93	1.12	0.0	0.0	0.0	0.0
GEUL	7.		1.00	0.0	0.0	15.00	2.50	9.60	0.0	64.50	3.10	0.0	0.0	0.0	0.0
URMOND	10.		2.00	0.0	0.0	0.0	1.90	7.48	0.50	1.99	1.45	0.0	0.0	0.0	0.0
GELFEN	16.		-2.00	0.0	0.0	0.0	0.0	3.06	0.0	1.99	1.00	0.0	0.0	0.0	0.0
SLUIS	19.		16.00	0.0	0.0	7.71	2.01	1.90	0.0	3.66	1.05	0.0	0.0	0.0	0.0
PANHEEL	21.		0.90	0.0	0.0	0.0	0.64	1.90	0.0	1.87	1.10	0.0	0.0	0.0	0.0
ROER	25.		0.70	0.0	0.0	3.50	0.67	5.44	0.0	3.87	1.53	0.0	0.0	0.0	0.0
SWALMBEEK	26.		5.20	0.0	0.0	5.36	2.57	5.95	0.0	0.28	1.53	0.0	0.0	0.0	0.0
NIERS	39.		7.50	0.0	0.0	3.85	2.73	5.95	0.0	0.28	1.53	0.0	0.0	0.0	0.0
DIEZE	46.														

\$\$\$ DATA TYPE 11+ (POINT SOURCE / POINT SOURCE CHARACTERISTICS) SPECIAL MEUSE OPTION \$\$\$

LOCATION	NR	CONC	BACTR	ORG-N	BOD	PPAR
DEFAULT	0.		0.0	0.0	0.0	0.0
DSM	10.		170.00	79.70	28.10	2.80

Bijlage III

Voorbeeld van de drie vormen van modeluitvoer

1. Uitvoer per stof
2. Uitvoer van alle stoffen per rekenelement
3. Uitvoer als 2) op geselecteerde kilometrages

[illegible]

STREAM QUALITY SIMULATION

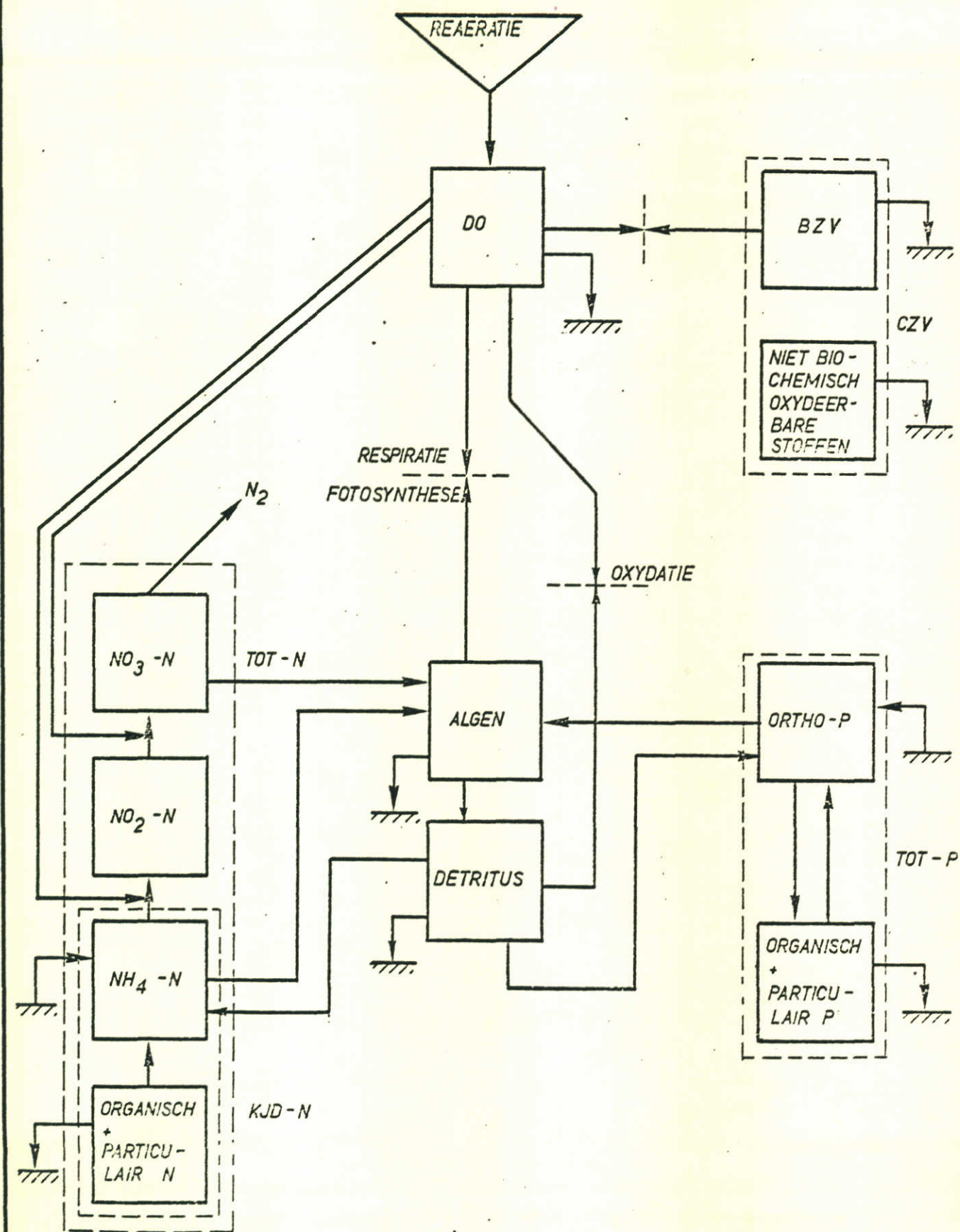
***** STEADY STATE SIMULATION *****

RCH	ELT	DIST	FLOW	INCR	CHL	DET	DO	BOD	ORGN	NH3N	NO2N	NO3N	KJEN	OX-N	TOTN	ORTP	PRTP	TOTP	F	CL
1	1	1	48	0	0	0	72	0	5	1	13	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	2	2	48	0	0	0	79	0	5	1	15	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	3	3	48	0	0	0	86	0	5	1	16	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	4	4	48	0	0	0	94	0	5	1	18	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	5	5	48	0	0	0	101	0	5	1	20	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	6	6	48	0	0	0	114	0	5	1	23	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	7	7	48	0	0	0	131	0	5	1	28	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	8	8	48	0	0	0	163	0	5	1	37	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	9	9	48	0	0	0	220	0	5	1	52	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	10	10	48	0	0	0	303	0	5	1	73	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	11	11	48	0	0	0	415	0	5	1	105	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	12	12	48	0	0	0	558	0	5	1	150	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	13	13	48	0	0	0	732	0	5	1	205	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	14	14	48	0	0	0	947	0	5	1	275	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	15	15	48	0	0	0	1202	0	5	1	370	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	16	16	48	0	0	0	1597	0	5	1	495	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	17	17	48	0	0	0	2122	0	5	1	650	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	18	18	48	0	0	0	2787	0	5	1	845	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	19	19	48	0	0	0	3592	0	5	1	1080	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	20	20	48	0	0	0	4547	0	5	1	1365	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	21	21	48	0	0	0	5752	0	5	1	1700	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	22	22	48	0	0	0	7207	0	5	1	2185	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	23	23	48	0	0	0	8912	0	5	1	2820	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	24	24	48	0	0	0	10867	0	5	1	3615	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	25	25	48	0	0	0	13072	0	5	1	4570	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	26	26	48	0	0	0	15527	0	5	1	5685	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	27	27	48	0	0	0	19232	0	5	1	7060	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	28	28	48	0	0	0	24187	0	5	1	8805	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	29	29	48	0	0	0	30392	0	5	1	10920	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	30	30	48	0	0	0	37007	0	5	1	13305	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	31	31	48	0	0	0	44112	0	5	1	15920	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	32	32	48	0	0	0	51627	0	5	1	18735	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	33	33	48	0	0	0	59142	0	5	1	21550	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	34	34	48	0	0	0	66657	0	5	1	24365	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	35	35	48	0	0	0	74172	0	5	1	27180	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	36	36	48	0	0	0	81687	0	5	1	30000	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	37	37	48	0	0	0	89202	0	5	1	32815	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	38	38	48	0	0	0	96717	0	5	1	35630	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	39	39	48	0	0	0	104232	0	5	1	38445	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	40	40	48	0	0	0	111747	0	5	1	41260	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	41	41	48	0	0	0	119262	0	5	1	44075	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	42	42	48	0	0	0	126777	0	5	1	46890	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	43	43	48	0	0	0	134292	0	5	1	49705	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	44	44	48	0	0	0	141807	0	5	1	52520	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	45	45	48	0	0	0	149322	0	5	1	55335	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	46	46	48	0	0	0	156837	0	5	1	58150	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	47	47	48	0	0	0	164352	0	5	1	60965	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	48	48	48	0	0	0	171867	0	5	1	63780	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	49	49	48	0	0	0	179382	0	5	1	66595	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	50	50	48	0	0	0	186897	0	5	1	69410	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	51	51	48	0	0	0	194412	0	5	1	72225	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	52	52	48	0	0	0	201927	0	5	1	75040	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	53	53	48	0	0	0	209442	0	5	1	77855	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	54	54	48	0	0	0	216957	0	5	1	80670	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	55	55	48	0	0	0	224472	0	5	1	83485	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	56	56	48	0	0	0	231987	0	5	1	86300	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	57	57	48	0	0	0	239502	0	5	1	89115	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	58	58	48	0	0	0	247017	0	5	1	91930	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	59	59	48	0	0	0	254532	0	5	1	94745	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	60	60	48	0	0	0	262047	0	5	1	97560	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	61	61	48	0	0	0	269562	0	5	1	100375	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	62	62	48	0	0	0	277077	0	5	1	103190	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	63	63	48	0	0	0	284592	0	5	1	106005	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	64	64	48	0	0	0	292107	0	5	1	108820	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	65	65	48	0	0	0	299622	0	5	1	111635	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	66	66	48	0	0	0	307137	0	5	1	114450	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	67	67	48	0	0	0	314652	0	5	1	117265	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	68	68	48	0	0	0	322167	0	5	1	120080	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	69	69	48	0	0	0	329682	0	5	1	122895	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	70	70	48	0	0	0	337197	0	5	1	125710	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	71	71	48	0	0	0	344712	0	5	1	128525	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	72	72	48	0	0	0	352227	0	5	1	131340	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	73	73	48	0	0	0	359742	0	5	1	134155	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	74	74	48	0	0	0	367257	0	5	1	136970	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	75	75	48	0	0	0	374772	0	5	1	139785	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	76	76	48	0	0	0	382287	0	5	1	142600	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	77	77	48	0	0	0	389802	0	5	1	145415	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	78	78	48	0	0	0	397317	0	5	1	148230	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	79	79	48	0	0	0	404832	0	5	1	151045	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	80	80	48	0	0	0	412347	0	5	1	153860	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	81	81	48	0	0	0	419862	0	5	1	156675	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	82	82	48	0	0	0	427377	0	5	1	159490	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	83	83	48	0	0	0	434892	0	5	1	162305	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	84	84	48	0	0	0	442407	0	5	1	165120	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	85	85	48	0	0	0	449922	0	5	1	167935	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	86	86	48	0	0	0	457437	0	5	1	170750	2	3	4	9	5	17	0	1	1
1	87	87	48	0	0	0	464952	0	5											

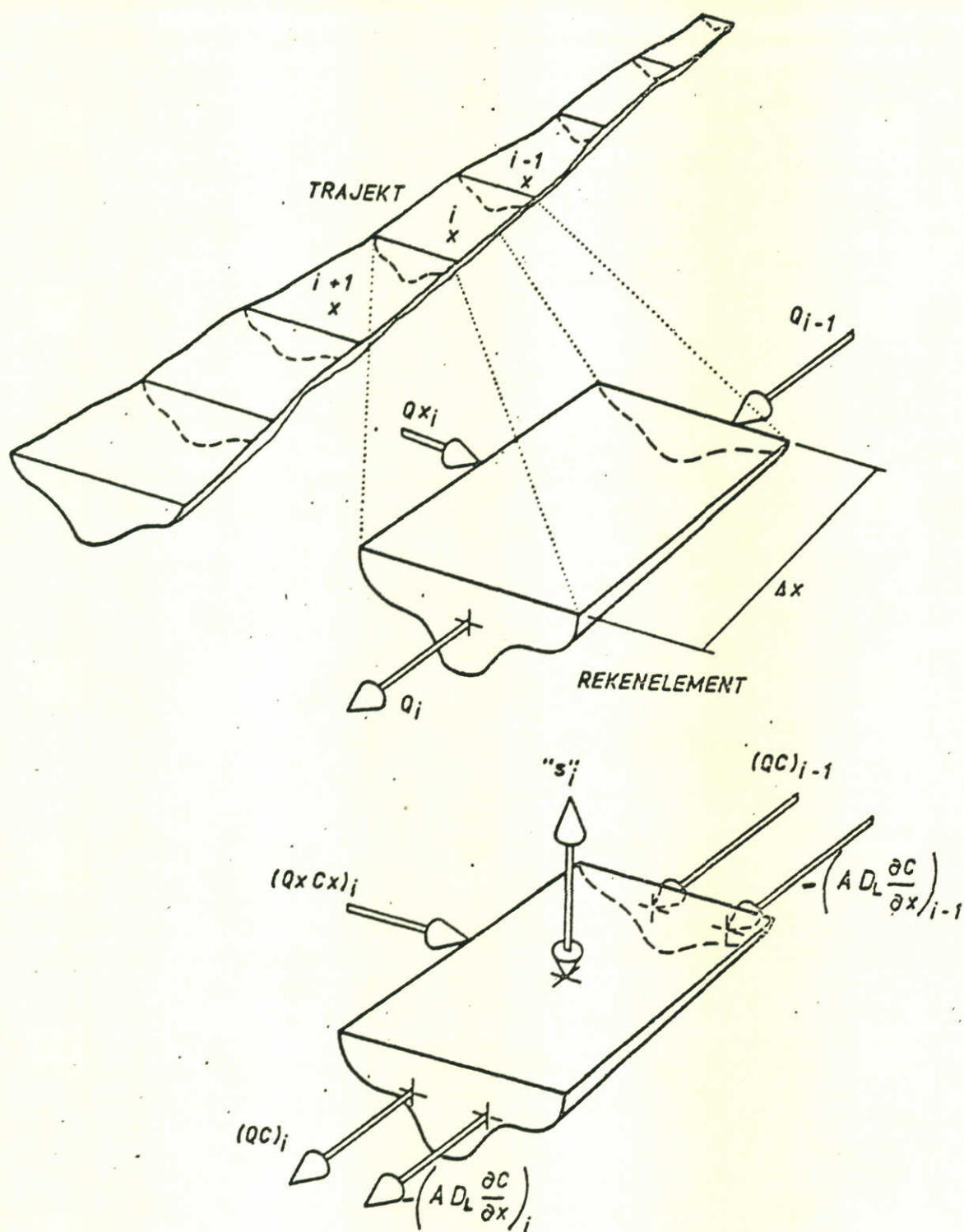
	RCH	ELT	DIST	FLOW	INCR	CHL	DET	DO	BOD	ORGN	NH3N	NO2N	NO3N	KJEN	OX-N	TOTN	ORTP	PRTP	TOTP	F	CL
3	1.0	3.0	3.0	48.7	0.0	0.026	0.001	7.866	14.466	1.525	1.093	0.152	2.414	2.617	2.447	5.064	0.589	0.173	0.762	1.170	0.000
16	2.0	3.0	16.0	39.1	0.0	0.037	0.005	8.023	17.419	1.528	1.048	0.185	2.414	2.576	2.599	5.175	0.630	0.194	0.824	1.127	0.045
51	8.0	5.0	51.0	34.7	0.06	0.047	0.008	6.635	22.548	2.318	2.369	0.600	2.699	2.387	2.302	10.690	0.637	0.199	0.836	1.125	0.162
61	11.0	20.0	61.0	10.5	0.0	0.051	0.010	6.944	23.710	2.492	2.607	0.188	2.417	2.609	2.604	4.703	0.607	0.177	0.784	0.948	0.164
88	11.2	12.0	33.0	10.5	0.0	0.049	0.014	6.809	23.550	1.435	0.595	0.145	2.561	2.602	2.707	4.736	0.509	0.150	0.659	1.127	0.090
101	12.0	3.0	62.0	45.6	0.0	0.054	0.014	8.108	25.311	1.997	1.920	0.489	2.548	2.917	2.837	8.755	0.645	0.173	0.827	1.124	0.690
110	16.0	2.0	84.0	52.0	0.0	0.052	0.012	9.023	26.397	2.018	2.005	0.363	2.685	3.023	2.837	9.071	0.627	0.221	0.855	0.943	0.355
140	17.0	15.0	101.0	65.1	0.0	0.058	0.016	9.497	27.591	1.894	1.565	0.387	2.941	3.459	3.288	10.786	0.671	0.213	0.784	0.643	0.359
185	20.0	16.0	146.0	66.6	0.0	0.067	0.023	10.508	33.160	1.930	1.248	0.344	3.280	3.050	2.572	11.622	0.698	0.194	0.692	0.644	0.313
214	22.0	13.0	175.0	73.3	0.0	0.069	0.023	10.508	33.160	1.930	1.248	0.344	3.280	3.050	2.572	11.622	0.698	0.194	0.692	0.644	0.313
240	24.0	11.0	201.0	73.9	0.0	0.073	0.027	10.206	33.440	1.706	0.910	0.276	3.404	3.729	3.681	12.410	0.499	0.177	0.608	0.591	0.391
259	26.0	11.0	220.0	79.2	0.0	0.071	0.029	10.670	32.301	1.706	0.910	0.276	3.404	3.729	3.681	12.410	0.499	0.177	0.608	0.591	0.391
286	28.0	17.0	247.0		0.0	0.061	0.028	9.777	27.953	1.624	0.926	0.250	3.183	3.550	3.708	13.133	0.423	0.171	0.595	0.552	0.486

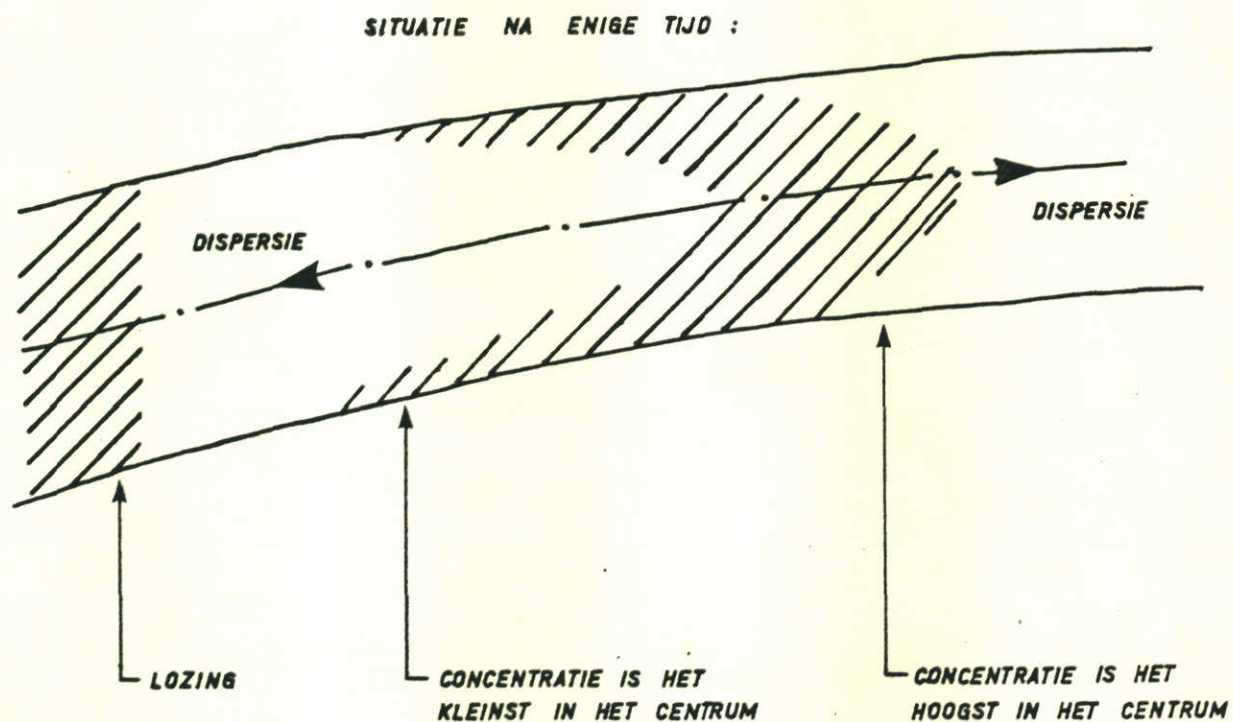
Bijlage IV

Voorbeeld van de uitvoer van fluxen en modelparameters



Integrale modelstructuur van MODQUAL

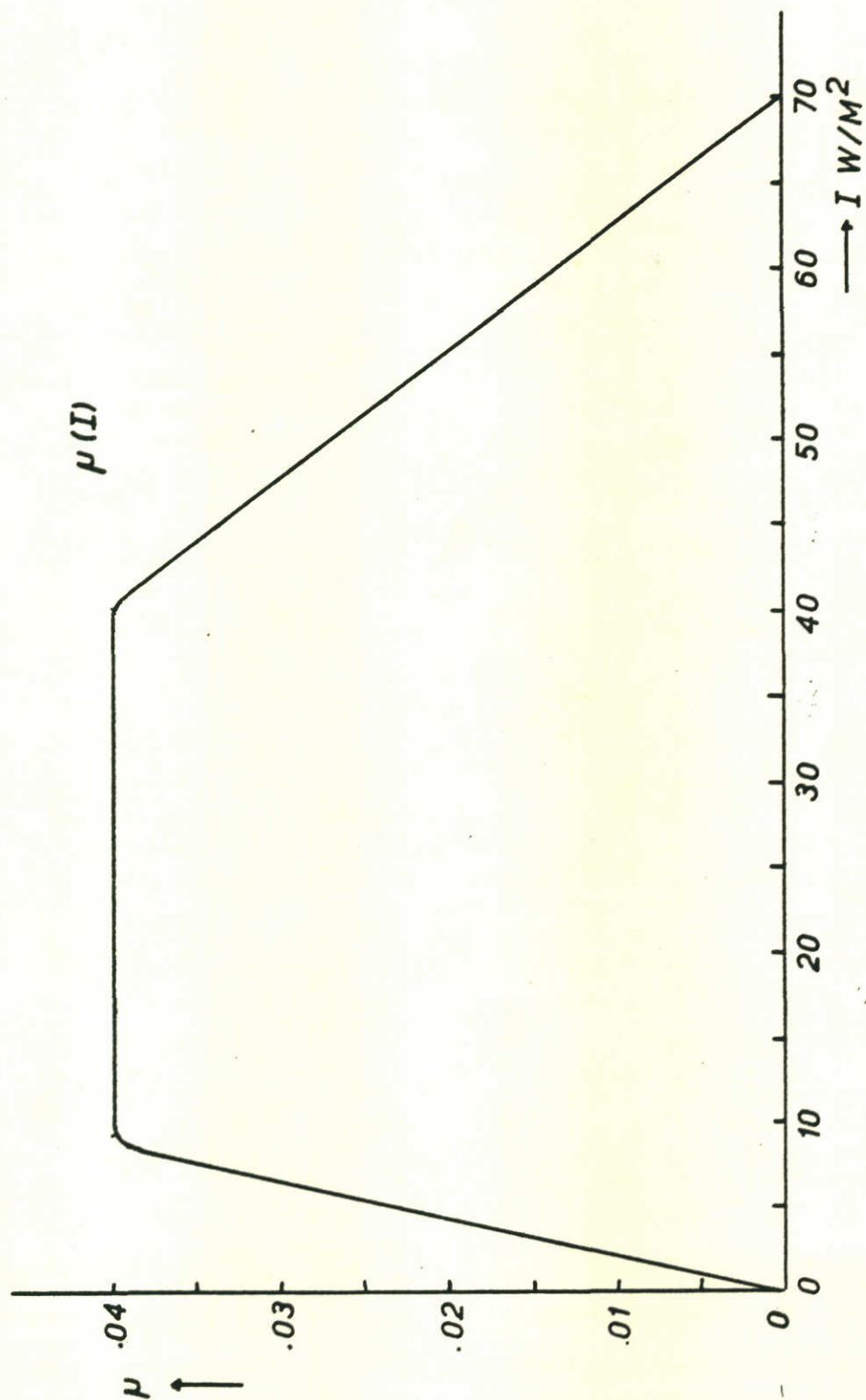




Schematische weergave van dispersie in rivieren ten
gevolge van snelheidsverschillen

Figuur 3

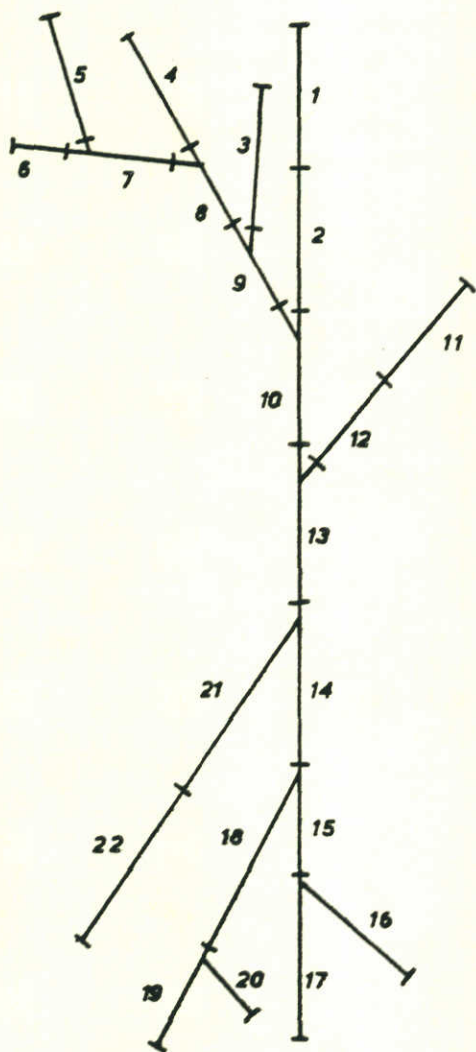
A4



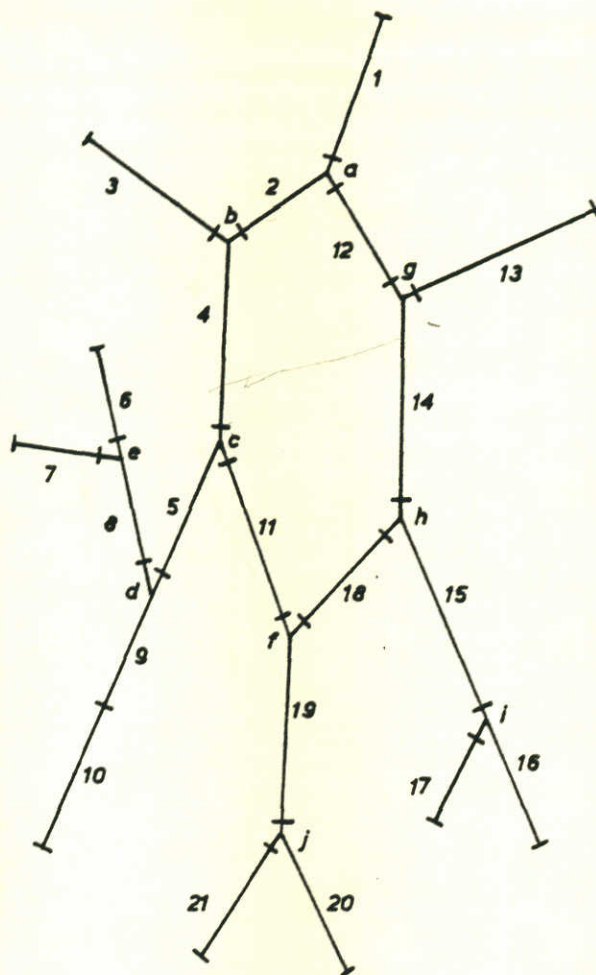
Algengroei-afhankelijkheid van licht

Figuur 4

A4



VOORBEELD 1



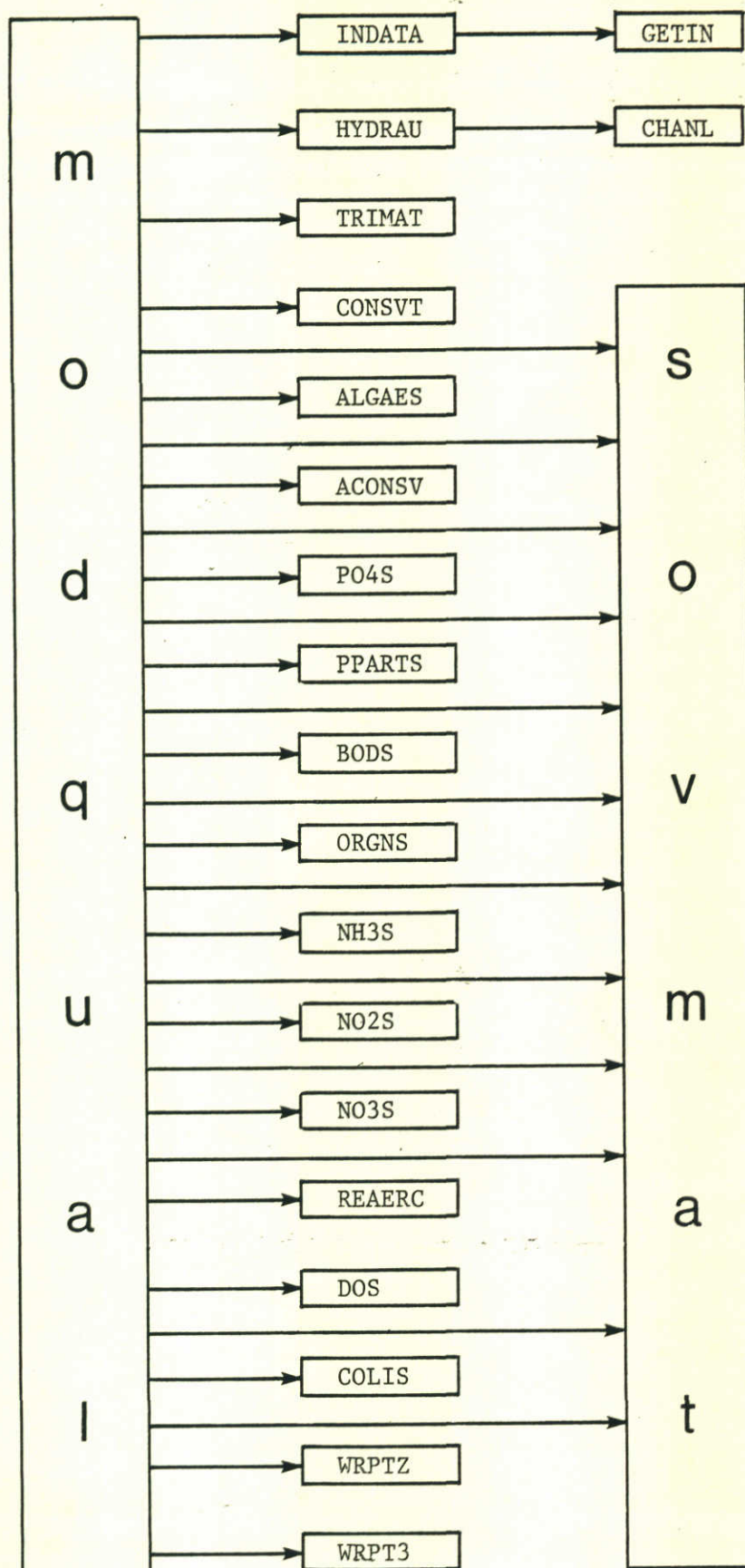
VOORBEELD 2

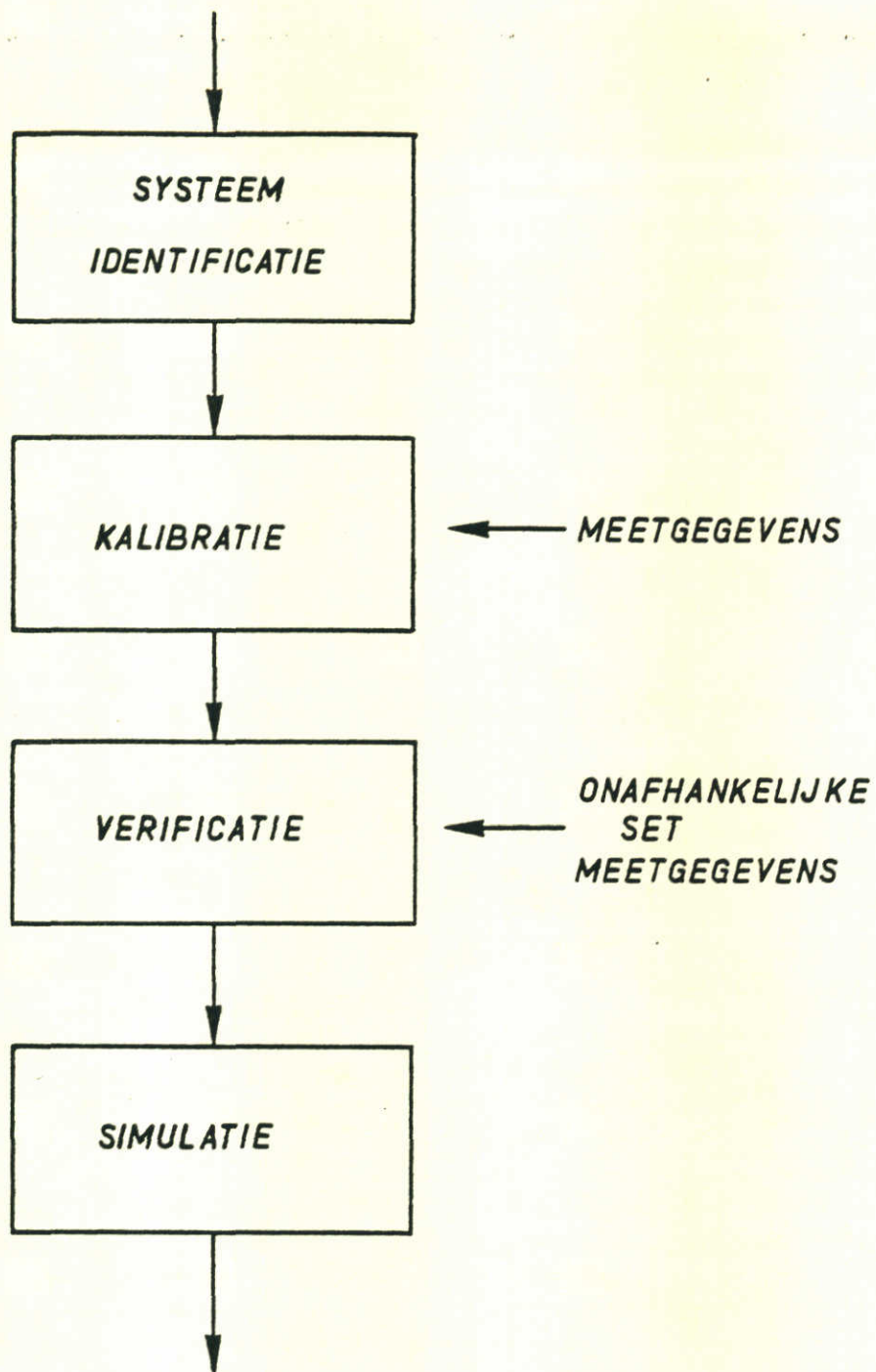
Enige mogelijke netwerkconfiguraties in MODQUAL

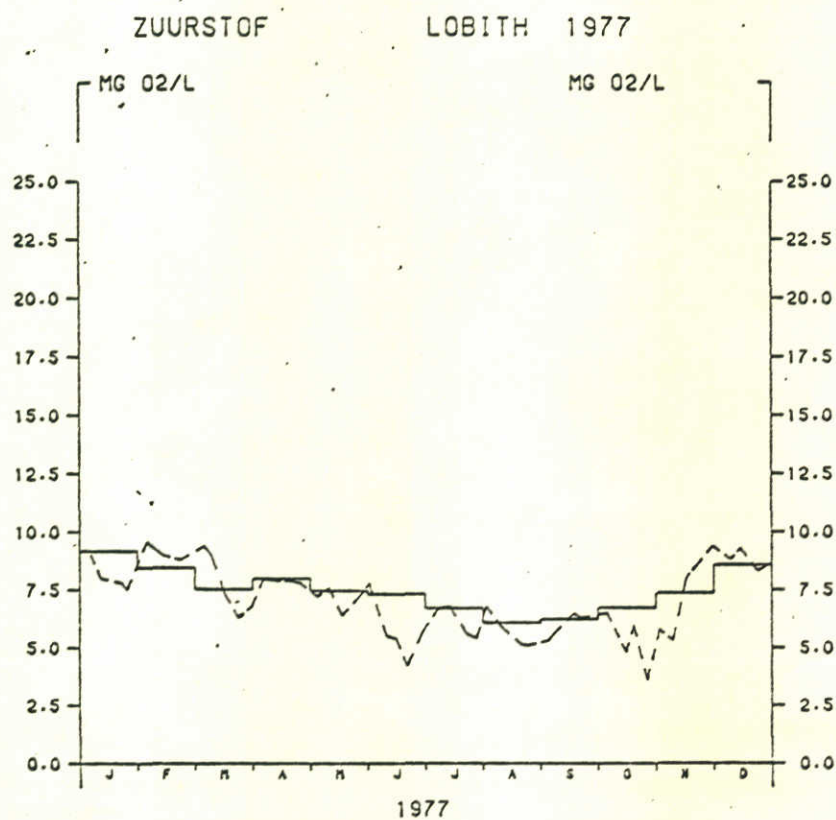
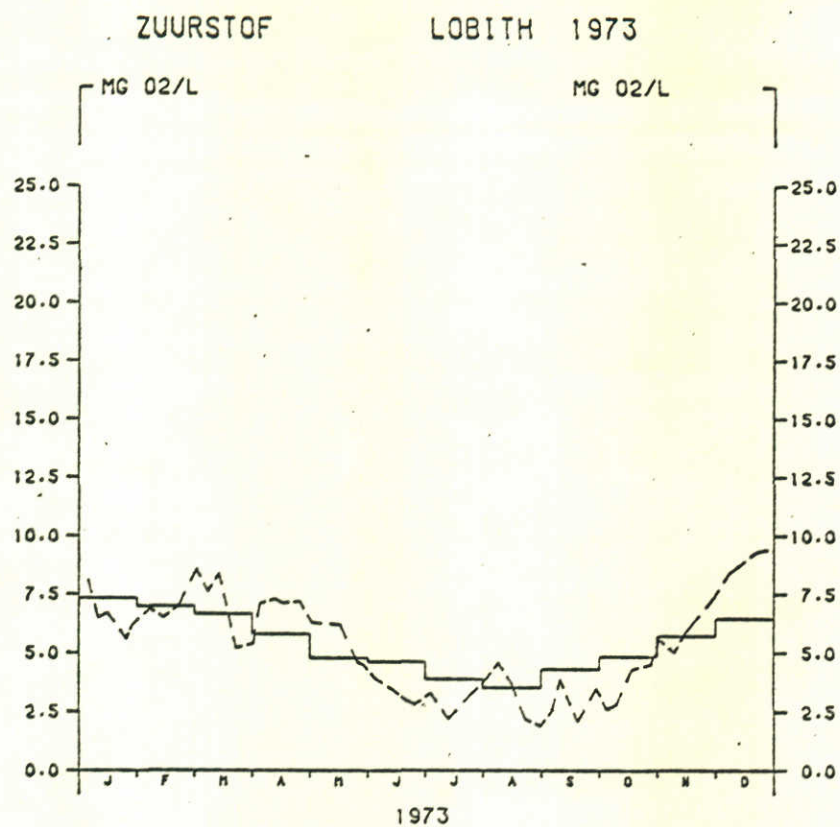
Figuur 5

A4

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM







MODEL WATERKWALITEIT RIJN

Kalibratie (1973) en verifikatie (1977)

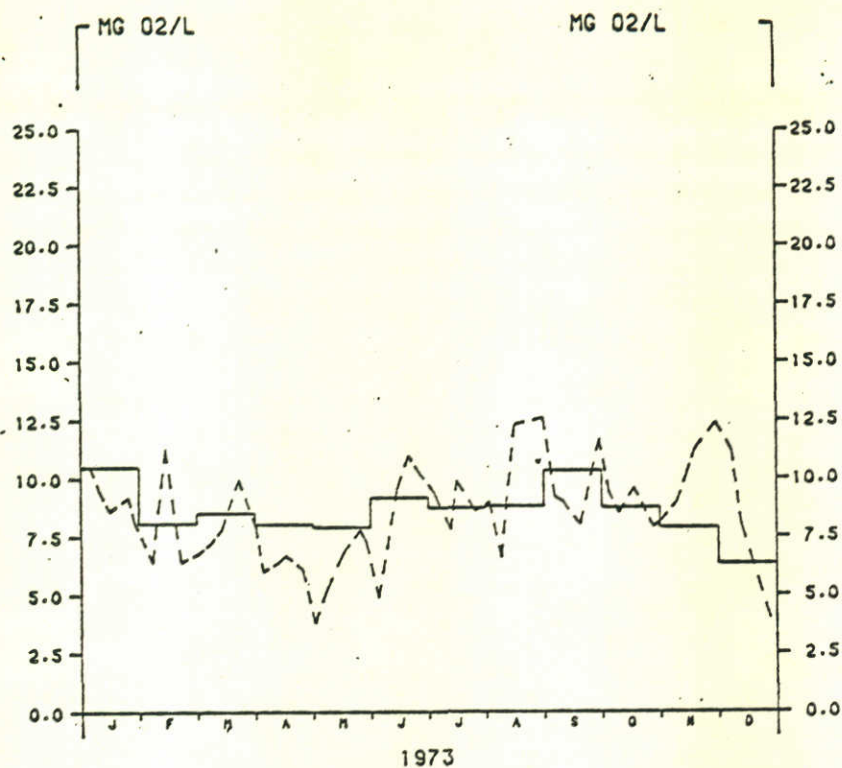
ZUURSTOF (O₂)

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

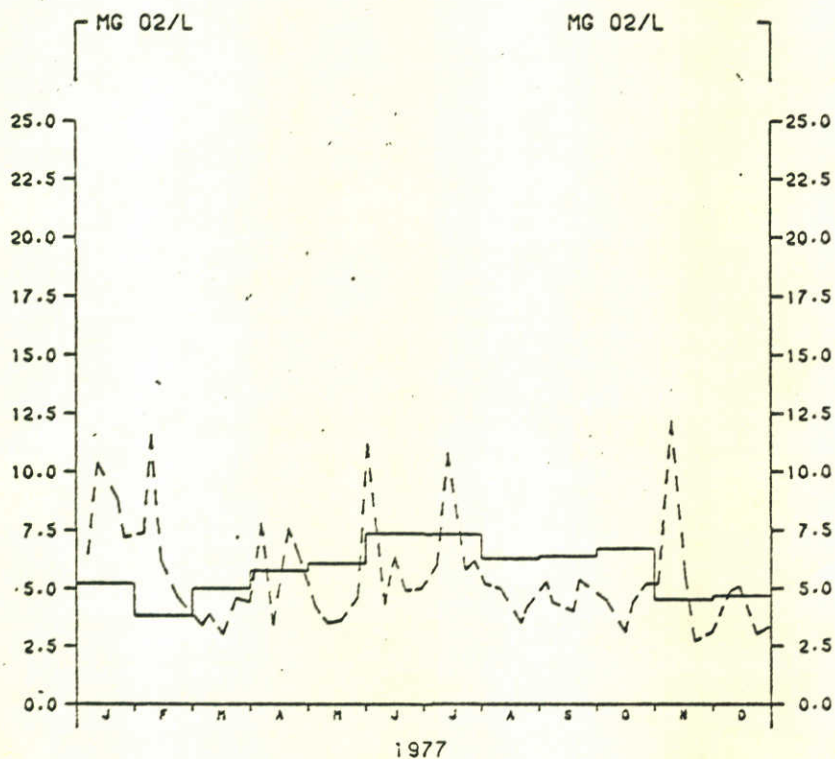
Fig. 8

A4

BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. LOBITH 1973



BIOCHEM. ZUURSTOFVERBR. LOBITH 1977



MODEL WATERKWALITEIT RIJN

kalibratie (1973) en verifikatie (1977)

BIOCHEMISCH ZUURSTOFVERBRUIK (BZV)

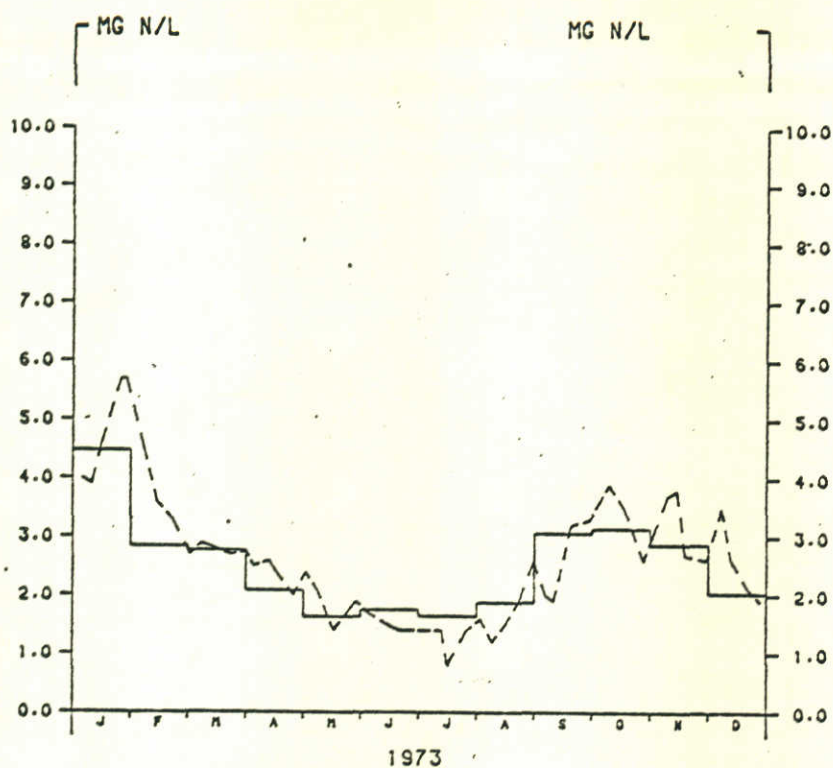
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

Fig. 9

A4

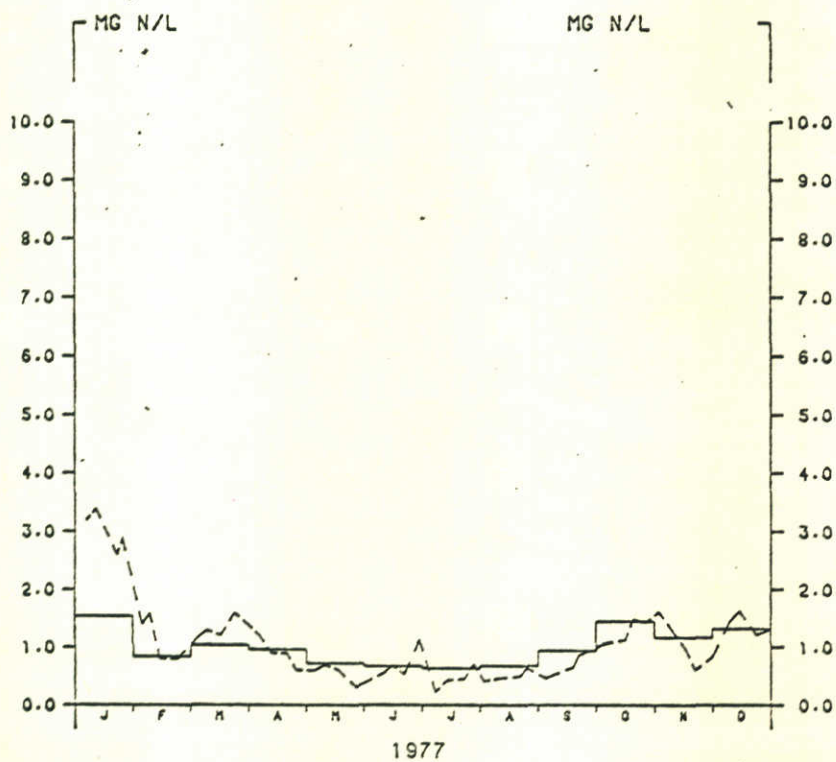
AMMONIUM-STIKSTOF

LOBITH 1973



AMMONIUM-STIKSTOF

LOBITH 1977



MODEL WATERKWALITEIT RIJN

kalibratie (1973) en verificatie (1977)

AMMONIUM (NH_4^+)

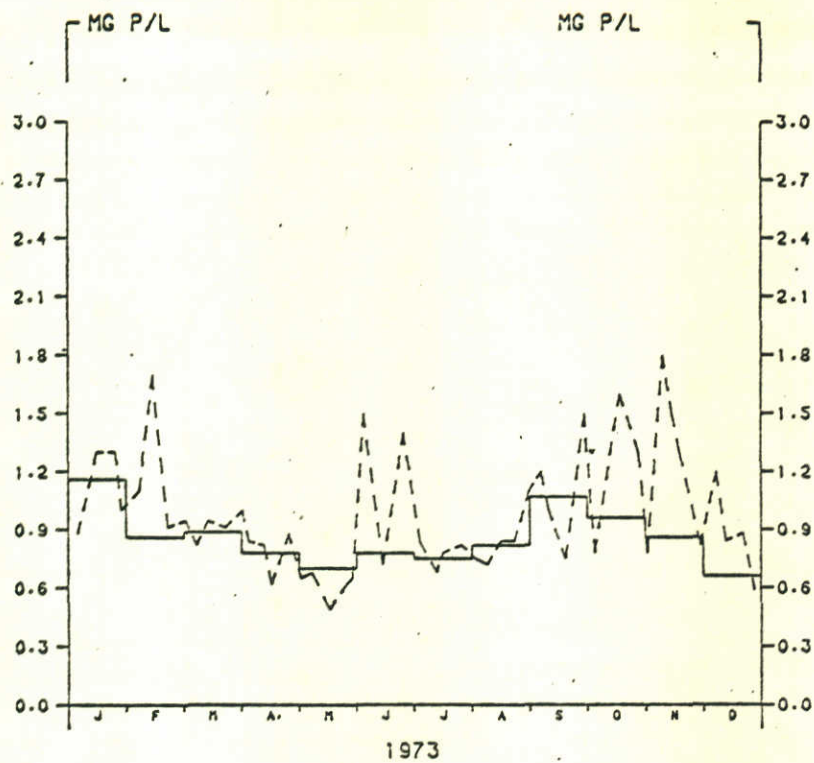
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

Fig. 10

A4

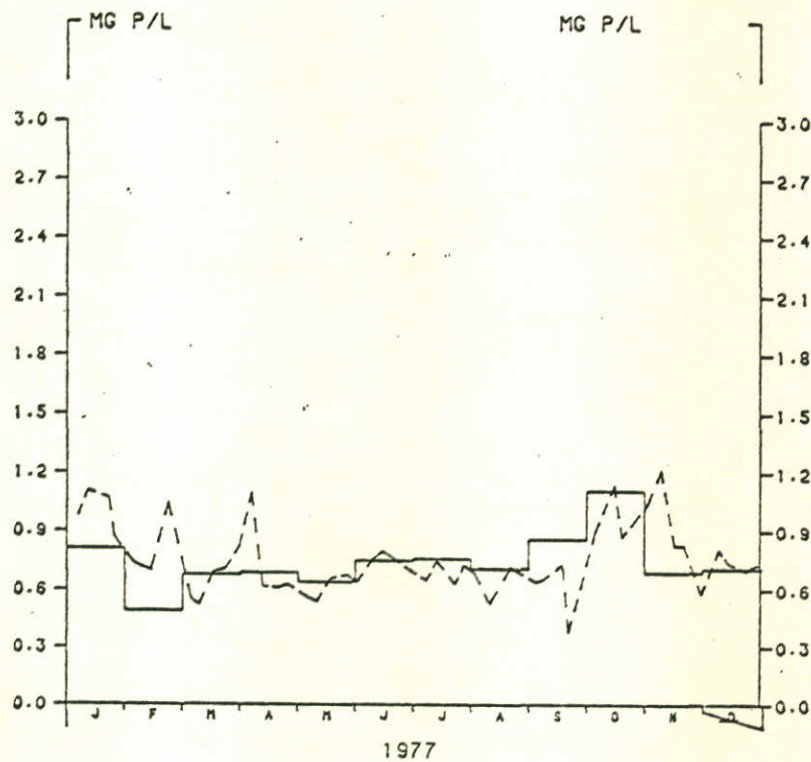
TOTAAL-FOSFAAT

LOBITH 1973



TOTAAL-FOSFAAT

LOBITH 1977



MODEL WATERKWALITEIT RIJN

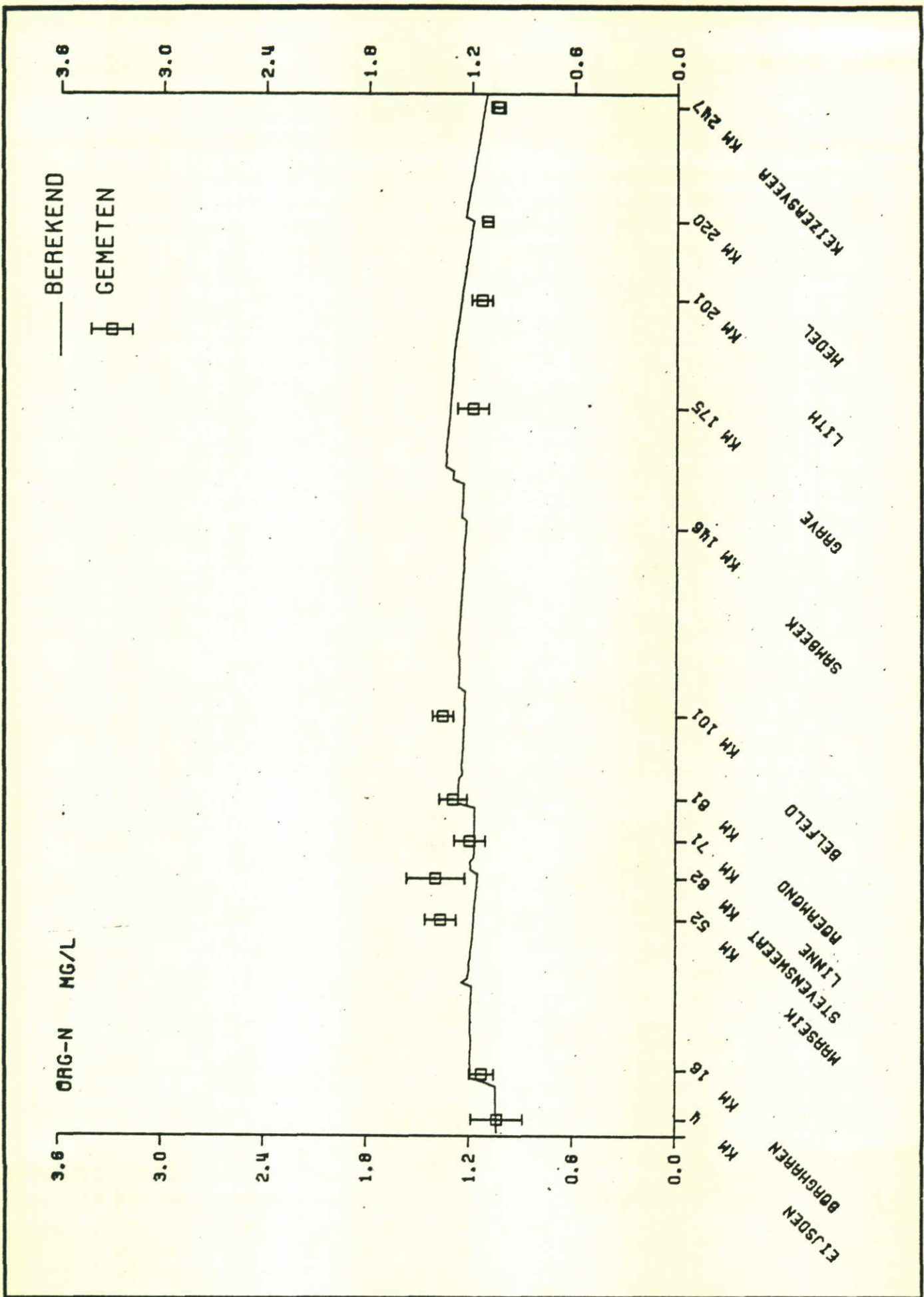
kalibratie (1973) en verifikatie (1977)

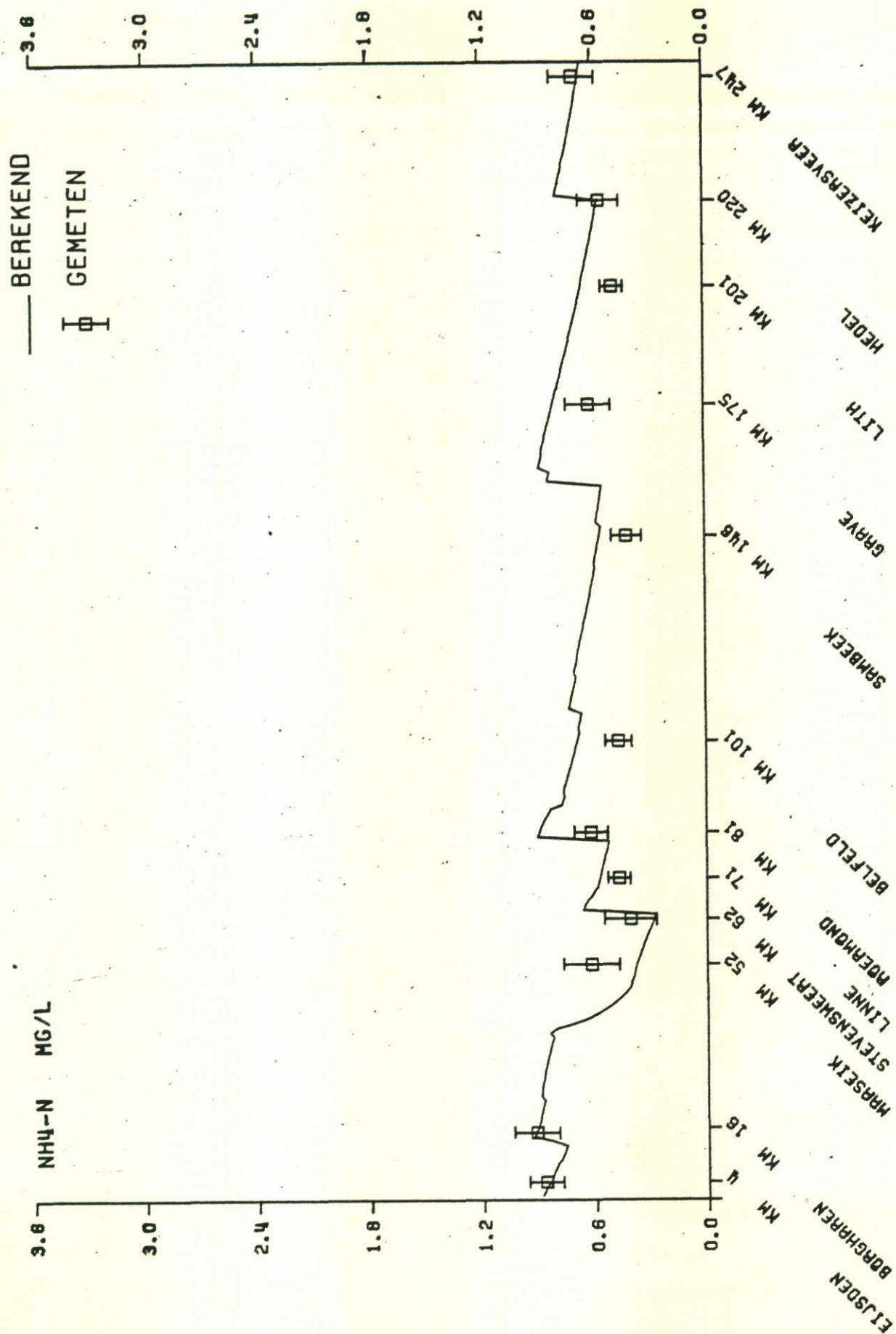
TOTAAL-FOSFAAT (tot-P)

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

Fig. 11

A4





MODEL WATERKWALITEIT MAAS

Verifikatieperiode 1-7-1979 t/m 31-10-1979

AMMONIUM

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

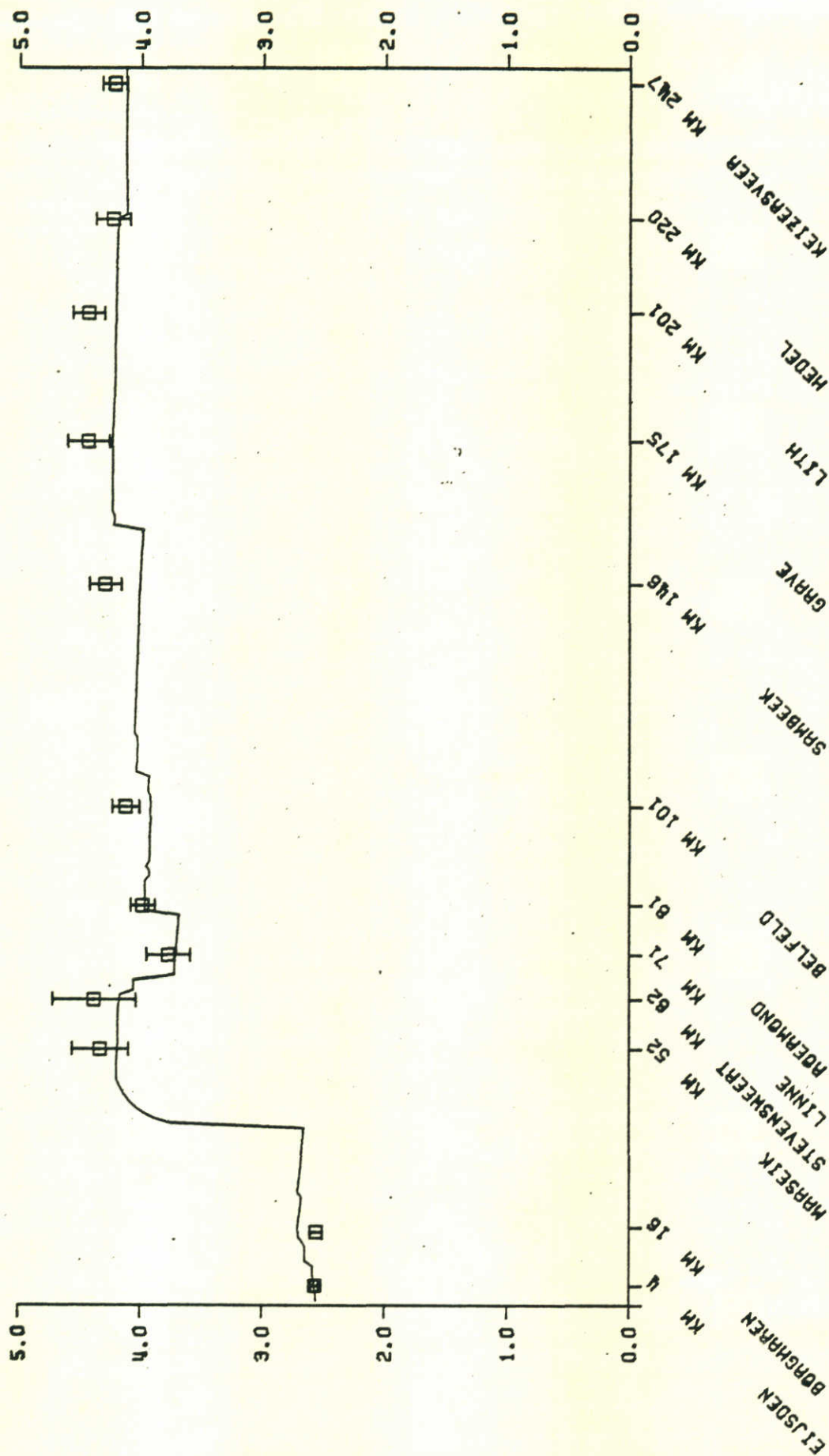
Fig. 13

A4

BEREKEND

GEMETEN

NO₂+NO₃ MG/L



MODEL WATERKWALITEIT MAAS

Verifikatieperiode 1-7-1979 t/m 31-10-1979

(NITRIET + NITRAAT) (-N)

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

Fig. 14

A4

p.o. box 177

2600 mh delft

the netherlands