

Opdrachtgever:
Rijkswaterstaat, RIKZ

Generiek Estuarium Model (GEM)

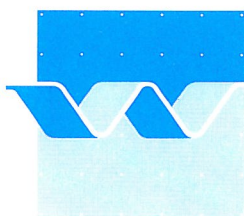
Fase 2: Technisch ontwerp

Discussiedocument
November 1995

Generiek Estuarium Model (GEM)

Fase 2: Technisch ontwerp

J.G.C. Smits, J.A. van Pagee, F.J. Los, P.M.A. Boderie



Inhoud

	Projectgegevens	ii
	Samenvatting	iii
1	Inleiding	1
2	Werkwijze	3
3	Keuze estuaria voor implementatie pilot-GEM	5
4	Technisch ontwerp pilot-GEM	7
	4.1 Functionaliteit	7
	4.2 Functionele groepen	9
	4.3 Toestandsvariabelen	9
	4.4 Processen en procesformuleringen	11
	4.4.1 Nutriënten	11
	4.4.2 Primaire producenten	16
	4.4.3 Primaire consumenten	18
	4.4.4 Organische stof	19
	4.4.5 Overige stoffen	20
	4.5 Stoftransport en schematisatie	21
	4.6 Invoer	28
	4.7 Uitvoer	29
	4.8 Basisstructuur	30
	4.9 Specificaties hardware en software	33
5	Discussie, conclusies en aanbevelingen	35
6	Literatuur	37
	Appendix 1: Koppeling van SLIB3D met het MANS/KSENOS-model	38

Projectgegevens

Projecttitel	:	Generiek Estuarium Model; Fase 2: Technisch ontwerp
Opdrachtgever	:	RIKZ, Rijkswaterstaat
Opdrachtnummer	:	22952177 (15 september 1995), BEON-ECOLMOD
Duur	:	Van 15 september tot 15 november 1995
PL opdrachtgever	:	drs. M.W.M. van der Tol
Omschrijving	:	Een technisch ontwerp is opgesteld van het pilot-GEM, dat qua inhoud (functionaliteit, functionele groepen, variabelen en processen) en vorm (programmatuur) een werkend model is en kan worden geïmplementeerd op een tweetal geselecteerde estuariene watersystemen
Produkt	:	Het voorliggende discussiedocument, dat het technisch ontwerp van het pilot-GEM bevat
Uitvoerenden	:	ir. J.G.C. Smits (projectleider, (bio)chemische processen), drs. F.J. Los (biologische processen), ir. J.A. van Pagee (transportprocessen en schematisatie), ir. P.M.A. Boderie (DELWAQ-aspecten)
Samenwerking	:	RIKZ leverde informatie toe met betrekking tot de keuze van estuaria. IBN-DLO, NIOO-CEMO en NIOZ zijn als (beoogde) participanten in de ontwikkeling van GEM in de gelegenheid gesteld het concept rapport te becommentariëren.

Samenvatting

Een technisch ontwerp is opgesteld van het pilot-versie van het Generiek Estuarium Model (GEM) op basis van het sterk modulair opgebouwde DELWAQ 4. Hoewel beperkt ten opzichte van het functioneel ontwerp, is het pilot-GEM qua inhoud en vorm een werkend model. Het bevat voldoende detail om een zinvolle implementatie op estuariene watersystemen mogelijk te maken. De voor implementatie geselecteerde watersystemen zijn de Westerschelde en de westelijke Waddenzee.

Keuzen zijn gemaakt met betrekking tot de in het pilot-GEM op te nemen functionaliteit, functionele groepen, variabelen, processen en procesformuleringen. Een innovatieve modellering van de transportprocessen is uitgewerkt. Het maken van keuzen verliep via analyse van het functioneel ontwerp en van de ontwikkelingen bij beleid, beheer en onderzoek. De volgende criteria werden gehanteerd:

- de urgentie vanuit beleids- en beheersvragen;
- de eisen vanuit de implementatie op een tweetal watersystemen;
- de noodzaak alternatieven naast elkaar beschikbaar te maken;
- voorkeuren van de betrokken instituten;
- de beschikbaarheid/buikbaarheid van bestaande stukken programmatuur;
- logische samenhang; en
- de benodigde inspanning bij de modelbouw.

Het technisch ontwerp van het pilot-GEM heeft de volgende hoofdkenmerken:

- Te beantwoorden vragen hebben vooral betrekking op veranderingen, die teweeg gebracht worden door antropogeen beïnvloede externe factoren (stofbelasting);
- Dynamisch gemodelleerd worden nutriënten (N,P,Si), fytoplankton, microfytobenthos, detritus, slib, zuurstof en chloride.
- Zoöplankton en suspensieëters worden als forcing functies opgelegd.
- Het pilot-GEM wordt geïmplementeerd in DELWAQ 4. Voor procesformuleringen wordt in belangrijke mate geleund op voor dit modelinstrumentarium reeds beschikbare, generieke procesroutines.
- Het algoritme voor het stoftransport omvat het aggregeren van en het disaggregeren naar een fijner grid om de terugkoppeling van de ecologische- en waterkwaliteitsprocessen op het transport tot stand te brengen.

Op specifieke onderdelen zijn verschillende naast elkaar te implementeren alternatieven voorgesteld in verband met hieromtrent bestaande wetenschappelijke controverses. Dit betreft de modellering van fytoplankton en de bodem-water uitwisseling van nutriënten. Op andere onderdelen is gekozen voor een generieke combinatie van formuleringen van verschillende modellen.

Ten aanzien van het stoftransport wordt ook (dis)aggregatie over de tijd voorgesteld. De realisatie hiervan in het pilot-GEM kan echter in verband met de omvang van de benodigde inspanning een stap te ver blijken te zijn.

1 Inleiding

Achtergrond en doel

Voor de ontwikkeling van het Generiek Estuarium Model (GEM) is een gefaseerde uitvoering voorzien. Fase 1 betrof het maken van een methodologisch ontwerp. De aanzet tot dit ontwerp kwam tot stand in een samenwerkingsproject van WL, IBN-DLO, NIOO-CEMO, NIOZ en RIKZ (WL et al., maart 1995). De hierbij gehanteerde uitgangspunten zijn ook omschreven in het Programma van Eisen (RIKZ, november 1993).

Het voorliggende verslag betreft fase 2, het opstellen van het technisch ontwerp van een pilot-GEM. Bij het opstellen van het technisch ontwerp is ervan uitgegaan dat het pilot-GEM in een volgende fase als model met beperkte functionaliteit zal worden gebouwd en geïmplementeerd voor een tweetal estuariene watersystemen. In de laatste fase zal het pilot-GEM kunnen worden uitgebreid tot het beoogde volledige modelinstrumentarium. Het pilot-GEM is daarom gedefiniëerd als een werkend model dat:

- nog niet de volledige functionaliteit heeft zoals omschreven in de aanzet voor het functioneel ontwerp; maar
- voldoende detail bevat om een zinvolle implementatie op een tweetal estuariene watersystemen mogelijk te maken.

Dit impliceert het maken van keuzen met betrekking tot:

- de in het pilot-GEM op te nemen functionaliteit, functionele groepen, variabelen, processen en procesformuleringen; en
- de watersystemen, waarvoor implementatie zal plaatsvinden.

De keuzen hebben een relatie met de omvang van de inspanning (middelen) die in fase 3 van de GEM-ontwikkeling geleverd kan worden bij de bouw van het pilot-GEM. Consequenties in dit opzicht hebben daarom bij de keuze een rol gespeeld.

Bij het opstellen van het ontwerp zijn de volgende uitgangspunten gehanteerd:

- het rapport "Generiek Estuarium Model (GEM); Aanzet voor het functioneel ontwerp" (WL et al., 1995);
- implementatie in DELWAQ 4;
- uitbreidbaarheid tot de gewenste functionaliteit; en
- implementeerbaarheid voor twee verschillende estuariene watersystemen.

Specificatie van een menu-gedreven gebruiksschil behoorde niet tot de opdracht. Desalniettemin wordt hieraan enige aandacht besteed.

Het rapport

Hoofdstuk 2 geeft een overzicht van de uitgevoerde werkzaamheden en licht de werkwijze bij het opstellen van het ontwerp toe.

Hoofdstuk 3 beschrijft de keuze van estuaria voor implementatie van het pilot-GEM en de overwegingen die tot de gemaakte keuze hebben geleid.

Het technisch ontwerp van het pilot-GEM is beschreven in hoofdstuk 4. In een zevental paragrafen worden de specificaties gegeven van inhoud en vorm van het pilot-GEM. De overige twee paragrafen bieden inzicht in de globale structuur van het model en de vereisten met betrekking tot hardware en software. Per onderdeel wordt ook steeds aangegeven welke toekomstige uitbreidingen te voorzien zijn op grond van het functioneel ontwerp. Voor zover niet expliciet genoemd, worden de beperkingen van het pilot-GEM zichtbaar door specificaties en uitbreidingen met elkaar te vergelijken.

Verantwoording

Het rapport is geschreven door J.G.C. Smits op basis van notities J.A. van Pagee (stoftransport), F.J. Los (biologische aspecten) en P.M.A. Boderie (DELWAQ-aspecten). De eerstgenoemde heeft tevens de kwaliteitscontrole op de rapportage uitgevoerd.

M.W.M. van der Tol heeft namens RIKZ informatie toegeleverd met betrekking tot beleidsprioriteiten, onderzoeksprogramma's en monitoring, benodigd voor van het maken van keuzen aangaande de inhoud van het pilot-GEM en de relevante Nederlandse estuarine watersystemen.

De inbreng van IBN-DLO, NIOO-CEMO en NIOZ is beperkt gebleven tot het leveren van commentaar op het concept rapport. Het in beperkte mate geleverde commentaar is zoveel mogelijk verwerkt. Dit rapport dient beschouwd te worden als een discussiedocument.

2 Werkwijze

De uitgevoerde activiteiten betreffen in globale volgorde van uitvoering:

- 1 keuze van de watersystemen, waarvoor implementatie zal plaatsvinden;
- 2 keuze van functionaliteit, functionele groepen, variabelen, processen en procesformuleringen;
- 3 uitwerking van de transportmodellering; en
- 4 ontwerp van de modelstructuur.

De keuze van estuaria (1) werd bepaald door:

- beschikbare veldgegevens c.q. op korte termijn te verwachten veldgegevens (onderzoek en monitoring);
- de urgentie vanuit beleids- en beheersvragen;
- de mate van divergentie van de watersystemen;
- de beschikbaarheid/buikbaarheid van berekende waterbeweging;
- de keuzen aangaande functionaliteit, functionele groepen en variabelen;
- mogelijkheden om via modeltoepassing veldonderzoek te versterken; en
- vergelijkbaarheid met eerdere modeltoepassingen.

Nagestreefd is om watersystemen te kiezen, die sterk verschillend van aard zijn, zodat na implementatie een goed beeld kan ontstaan van de toepasbaarheid van het GEM.

Het maken van de keuzen omtrent de inhoud van het pilot-GEM (2) verliep via analyse van het functioneel ontwerp en van de ontwikkelingen bij beleid, beheer en onderzoek. De volgende criteria werden gehanteerd:

- de urgentie vanuit beleids- en beheersvragen;
- de eisen vanuit de implementatie op een tweetal watersystemen;
- de noodzaak alternatieven naast elkaar beschikbaar te maken;
- voorkeuren van de betrokken instituten;
- de beschikbaarheid/buikbaarheid van bestaande stukken programmatuur;
- logische samenhang; en
- de benodigde inspanning bij de modelbouw.

De noodzaak om alternatieven naast elkaar beschikbaar te maken hangt in belangrijke mate samen met de bestaande wetenschappelijke controversen aangaande de modellering van onderdelen van het estuariene systeem, zoals de bodem-water uitwisseling en de primaire productie.

Het functioneel ontwerp stelt voor de transportmodellering (3) een innovatieve aanpak voor. De uitwerking van deze aanpak diende daarom zorgvuldig te geschieden. De relaties en interacties met de ecologische processen enerzijds en de technische haalbaarheid anderzijds kregen speciale aandacht. De volgende stappen werden gezet:

- ontwerpen van de koppeling van verschillende schematisaties voor waterbeweging, transport en ecologische processen;

- formulering van de transportprocessen in geaggregeerde schematisaties waarbij detailkennis van waterbeweging zoveel mogelijk wordt meegenomen; en
- ontwerpen van de koppeling van waterbeweging, transport en ecologische processen voor verschillende tijdschalen met mogelijkheden voor middeling en/of integratie in de tijd.

De modelstructuur (4) volgt uit analyse van het functioneel ontwerp, uit de bij activiteit 2 gemaakte keuzen en uit de voorgestelde transportmodellering. Het ontwerpen van het model verliep in de volgende stappen:

- formulering van de modulaire opbouw, de samenhang tussen modules en hoofdprogramma;
- specificatie van de massastromen in het model;
- uitwerking van de in modules te gebruiken concepten en formuleringen;
- specificatie van opties;
- specificatie van de invoer en de uitvoer;
- bepaling van de beperkingen van het ontwerp;
- vaststelling van overige relevante technische specificaties; en
- vastlegging van het ontwerp in stroomschema's.

Belangrijke criteria bij het ontwerpen waren behoud van flexibiliteit bij toepassing en uitbreidbaarheid naar het volledige modelinstrumentarium. Vanuit het eerste aspect is het onder andere nodig hardware-aspecten mee te nemen. Vanuit het tweede aspect is het ook noodzakelijk eisen te formuleren met betrekking tot de inpasbaarheid in een gebruiksschil. De beperkingen van het ontwerp zijn specifiek beschouwd tegen de achtergrond van DELWAQ 4 als vooraf gekozen implementatie-omgeving.

3 Keuze estuaria voor implementatie pilot-GEM

Voor het functioneel ontwerp is een lijst van zeven als estuarium beschouwde watersystemen opgesteld, welke met het GEM gemodelleerd dienen te kunnen worden. De lijst bevat naast echte estuaria (Westerschelde) ook ondiepe kustzeeën (Waddenzee) en stagnante systemen (Grevelingen en Veerse Meer). Met het oog op de in hoofdstuk 2 gestelde criteria is over deze estuariene systemen het volgende op te merken:

- **Westerschelde:**
 - zout estuarium met een geringe mate van stratificatie;
 - veel recente gegevens zijn beschikbaar, vooral omtrent waterkwaliteit maar ook aangaande fytoplankton en enkele primaire consumenten;
 - modellen zijn beschikbaar in de vorm van SAWES (DELWAQ 4) en MOSES van respectievelijk WL en NIOO/CEMO;
 - eenvoudige 1-D waterbeweging op basis van de afvoer van de Schelde beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse I veranderingen (zie paragraaf 4.1 voor indeling naar en belang van klassen);
 - modelmatige versterking van lopend/verwacht onderzoek is zeer gewenst;

- **Oosterschelde:**
 - zee-arm met enige thermische stratificatie;
 - veel oudere gegevens zijn beschikbaar van waterkwaliteit en van primaire producenten en consumenten;
 - een model is beschikbaar in de vorm van SMOES van RIKZ;
 - eenvoudige 1-D waterbeweging op basis van reststroom beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse II en klasse III veranderingen;
 - lopend/verwacht onderzoek is beperkt;

- **Grevelingenmeer:**
 - stagnant zout meer met thermische stratificatie;
 - relatief weinig gegevens zijn beschikbaar van waterkwaliteit en van primaire producenten en consumenten;
 - een model is beschikbaar in de vorm van GREWAQ (ECOLUMN) van WL;
 - eenvoudige 1-D waterbeweging op basis van waterbalans beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse II en klasse I veranderingen;
 - modelmatige versterking van lopend/verwacht onderzoek is gewenst;

- **Veerse Meer:**
 - stagnant brak meer met thermische en zoet-zout stratificatie;
 - weinig gegevens zijn beschikbaar van waterkwaliteit en primaire producenten;
 - een model is beschikbaar in de vorm van VEERWAQ (ECOLUMN) van WL;
 - eenvoudige 1-D waterbeweging op basis van waterbalans beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse II en klasse I veranderingen;
 - lopend/verwacht onderzoek is beperkt;

- **Westelijke Waddenzee:**
 - ondiepe kustzee ofwel lagune zonder stratificatie;
 - vrij veel gegevens zijn beschikbaar van waterkwaliteit en van primaire producenten en consumenten;
 - modellen zijn beschikbaar in de vorm van EMOWAD en EcoWasp van respectievelijk NIOZ en IBN-DLO;
 - eenvoudige gemodelleerde 2-D waterbeweging op basis van afvoer IJsselmeer en reststroom beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse I en klasse III veranderingen;
 - modelmatige versterking van lopend/verwacht onderzoek is gewenst;

- **Oostelijke Waddenzee:**
 - ondiepe kustzee ofwel lagune zonder stratificatie;
 - weinig gegevens zijn beschikbaar van waterkwaliteit, nog minder van primaire producenten en consumenten;
 - geen model beschikbaar;
 - geen waterbeweging beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse III en klasse I veranderingen;
 - modelmatige versterking van lopend/verwacht onderzoek is gewenst;

- **Eems-Dollard:**
 - zout estuarium zonder stratificatie;
 - gegevens zijn in beperkte mate beschikbaar van waterkwaliteit en van primaire producenten en consumenten;
 - een model is beschikbaar in de vorm van het Eems-Dollard model van NIOZ;
 - eenvoudige gemodelleerde 1-D waterbeweging op basis van de afvoer van de Eems beschikbaar;
 - beleids- en beheersvragen hebben vooral betrekking op klasse I veranderingen;
 - modelmatige versterking van lopend/verwacht onderzoek is niet urgent;

Gegeven het bovenstaande ligt het voor de hand om de Westerschelde als eerste keuze te noemen. De tweede keuze valt op de Westelijke Waddenzee. Daarmee zijn twee systemen gekozen met behoorlijk verschillende hydrodynamische condities en sterk verschillende morfologische en ecologische kenmerken. Een voordeel van deze keuze, met name vanuit de positie van RIKZ gezien, is dat haar regionale afdelingen zichzelf zullen kunnen herkennen in de eerste toepassingen van het pilot-GEM. Een nadeel van de gemaakte keuze is, dat er het gevaar ontstaat, dat specifieke bijzonderheden van stagnante systemen niet goed zullen worden meegenomen bij de opzet van het GEM.

4 Technisch ontwerp pilot-GEM

In de navolgende paragrafen wordt steeds uitgegaan van inventarisaties en keuzen, die vermeld zijn in het rapport "Generiek Estuarium Model (GEM); Aanzet voor het functioneel ontwerp" (WL et al., 1995). De lezer wordt naar dit rapport verwezen voor achtergronden en motivaties.

Elke paragraaf bestaat uit twee delen. Het eerste deel beschrijft de keuze voor het pilot-GEM. Het tweede deel geeft aan welke uitbreidingen nodig zijn om tot het volledige modelinstrumentarium te komen.

4.1 Functionaliteit

De gewenste functionaliteit van het GEM vloeit voort uit beleids- en beheersvragen. De vragen ontstaan door het optreden van ecologische veranderingen in estuariene watersystemen ten gevolge van a) veranderende menselijke activiteiten en b) veranderende autonome processen. Met name de laatste jaren is er een toenemende belangstelling voor effecten van combinaties van antropogene en autonome beïnvloeding van watersystemen. Relevante effecten betreffen vooral verandering van:

- 1 de belasting van het systeem door nutriënten;
- 2 de belasting van het systeem door slib en organische fracties van geloosd afvalwater;
- 3 de verblijftijd van het systeem;
- 4 de hydrodynamische condities;
- 5 de morfologie;
- 6 het zoutgehalte;
- 7 de slibconcentraties ten gevolge van baggerwerkzaamheden;
- 8 de schelpdiervisserij;
- 9 de schelpdiercultuur;
- 10 habitats;
- 11 het klimaat (o.a. trends daarin);
- 12 meteorologische condities (variabiliteit); en
- 13 andere autonome processen (deels toevalsprocessen).

De belasting met microverontreinigingen is voor estuaria een uiterst relevant probleem maar is toch niet genoemd, omdat het GEM zich vooralsnog beperkt tot eutrofiëring-gerelateerde aspecten.

De veranderingen kunnen tot de volgende vier klassen worden geaggregeerd:

- I antropogeen beïnvloede externe factoren (1,2);
- II systeemmanipulatie (3,4,5,6,10);
- III systeemgebruik (7,8,9); en
- IV autonome veranderingen (11,12,13).

Aan klasse I gerelateerde vragen zijn tot nu toe het belangrijkste geweest en zullen voorlopig ook het belangrijkste blijven. De vragen, die samenhangen met klasse IV, zijn weliswaar interessant maar het minst urgent. Via manipulatie van 'forcing' functies zullen de effecten van autonome veranderingen overigens in belangrijke mate in het GEM te realiseren zijn. Vragen aangaande klassen II en III zijn beleidsmatig van aanzienlijk belang en ontlopen in elkaar in dit opzicht niet veel.

Het meenemen van vragen behorend tot klasse II brengt een complicatie voor de modellering met zich mee in de vorm van de extrapoleerbaarheid naar gewijzigde morfologische en hydrodynamische condities. Bovendien moet de ruimtelijke schematisering zeer flexibel gewijzigd kunnen worden. Met name het eerste aspect zou een extra risico vormen voor de ontwikkeling van het pilot-GEM.

De beperkte ervaring met het dynamisch modelleren van primaire consumenten vormt een hindernis met betrekking tot het meenemen van vragen behorend tot klasse III.

Gegeven deze overwegingen, wordt voorgesteld de te realiseren functionaliteit van het pilot-GEM te richten op de beantwoording van vragen behorende tot klasse I. In het kader van vraagstellingen 1 en 2 moeten analyses uitgevoerd kunnen worden aangaande:

- kringlopen van stoffen (koolstof, nutriënten);
- retentie van stoffen (nutriënten);
- vergelijking van effecten van systeemverstoringen op verschillende watersystemen;
- de ordening en integratie van veldgegevens;
- schattingen van draagkracht voor hogere trofische niveaus; en
- het model als research object.

Dit betekent niet dat met het pilot-GEM geen vragen uit de andere klassen te beantwoorden zouden zijn. In tegendeel, vraagstukken met betrekking tot aspecten 3,4,7,8,11 en 12 zullen zeker ook onderzocht kunnen worden.

Voorziene uitbreidingen

De gewenste toekomstige uitbreiding van de functionaliteit betreft uiteraard de vragen van klassen II-IV, in het bijzonder aangaande aspecten 5,6,9,10 en 13. De capaciteit met betrekking tot het type analyses zal met name uitgebreid dienen te worden voor:

- risico-analyse;
- effecten van combinaties van systeemverstoringen (integrale analyse);
- vergelijking van effecten van verschillende systeemverstoringen op het watersysteem; en
- het model als research object.

4.2 Functionele groepen

Functionele groepen zijn voor het GEM gekozen omdat ze:

- een significante bijdrage leveren aan stofstromen;
- belangrijk zijn voor de sturing van het systeem; en/of
- relevant zijn voor beheer en beleid.

De prioriteiten ten aanzien van het pilot-GEM worden gesteld op grond van dezelfde criteria. Gezien de in het pilot-GEM te realiseren functionaliteit, worden daarom de volgende functionele groepen dynamisch gemodelleerd:

- nutriënten;
- primaire producenten;
- organische stof; en
- overige stoffen.

Voorziene uitbreidingen

Gewenste uitbreidingen betreffen dus met name de primaire consumenten. Bij de bouw van het GEM dient echter ook rekening met opname van microverontreinigingen te worden gehouden.

4.3 Toestandsvariabelen

Toestandsvariabelen zijn voor het GEM gekozen omdat ze:

- een significante bijdrage leveren aan stofstromen;
- belangrijk zijn voor de sturing van het systeem;
- relevant zijn voor beheer en beleid, voor zover passend binnen de stofstromenbenadering, dus alleen bottom-up gecontroleerde en niet top-down gecontroleerde variabelen;
- vergelijkbaar zijn ten aanzien van specifieke tijdsconstanten (ten hoogste twee ordegrottes verschillend); en
- meetbaar zijn.

De toestandsvariabelen zijn in te delen naar functionele groepen. In het perspectief van de voorgaande paragrafen is de keuze voor opname in het pilot-GEM gevallen op:

- *nutriënten:*
 - ammonium, nitraat en stikstof in organismen en detritus;
 - opgelost fosfaat, geadsorbeerd fosfaat, geprecipiteerd fosfaat en fosfaat in organismen en detritus;
 - opgelost silicaat, opaal silicaat en silicaat gebonden aan organismen;

- *primaire producenten:*
 - marine diatomeeën;
 - marine niet-diatomeeën, te weten dino-flagellaten, overige flagellaten en phaeocystis;
 - fluviaatiele diatomeeën;
 - fluviaatiele niet-diatomeeën, te weten groenwieren;
 - microfytobenthos;

- *organische stof:*
 - organische stof in de diverse organismen (per functionele groep);
 - twee afbreekbare detritus fracties;
 - twee refractaire detritus fracties (particulair en opgelost);

- *overige stoffen:*
 - zuurstof;
 - slib/zwevend stof;
 - chloride.

Van de primaire consumenten worden een beperkt aantal groepen en soorten opgenomen als 'forcing' functies. Dit betreft:

- *primaire consumenten:*
 - mesozoöplankton;
 - microzoöplankton;
 - suspensieëters (mossel en kokkel).

Opvallende omissies zijn met het oog op de Westerschelde het hyperbenthos en gereduceerde stoffen. Het hyperbenthos wordt echter kwantitatief niet zo belangrijk geacht, dat de modellering van fytoplankton met een onacceptabele onnauwkeurigheid zou kunnen geschieden. De rol van de gereduceerde stoffen kan desnoods op versimpelde wijze mee worden genomen in de vorm van een negatief zuurstofgehalte.

Een variabele en dynamische stoechiometrie wordt noodzakelijk geacht. Dit betekent dus dat het GEM voor elke toestandsvariabele met betrekking tot de groepen organische stof en primaire producenten vier toestandsvariabelen (C,N,P,Si) zal bevatten.

Voorziene uitbreidingen

De in de toekomst zoveel mogelijk als dynamische gemodelleerde parameters toe te voegen toestandsvariabelen betreffen:

- *primaire producenten:*
 - macrofyten waaronder met name ulva en zosteria;

- *primaire consumenten:*
 - mesozoöplankton;
 - microzoöplankton;
 - suspensieëters, waaronder mossel en kokkel;
 - sedimenteters; en
 - hyperbenthos.

- *organische stof:*
 - organische stof in toegevoegde organismen.

- *overige stoffen:*
 - gereduceerde stoffen (voor correcte berekening zuurstof dynamiek).

4.4 Processen en procesformuleringen

In het algemeen geldt dat de formuleringen in GEM zo generiek mogelijk dienen te zijn. Daarbij wordt een variabele en dynamische stoichiometrie gehanteerd. Voorts is de gelijke benadering in water en bodem van processen ook een uitgangspunt.

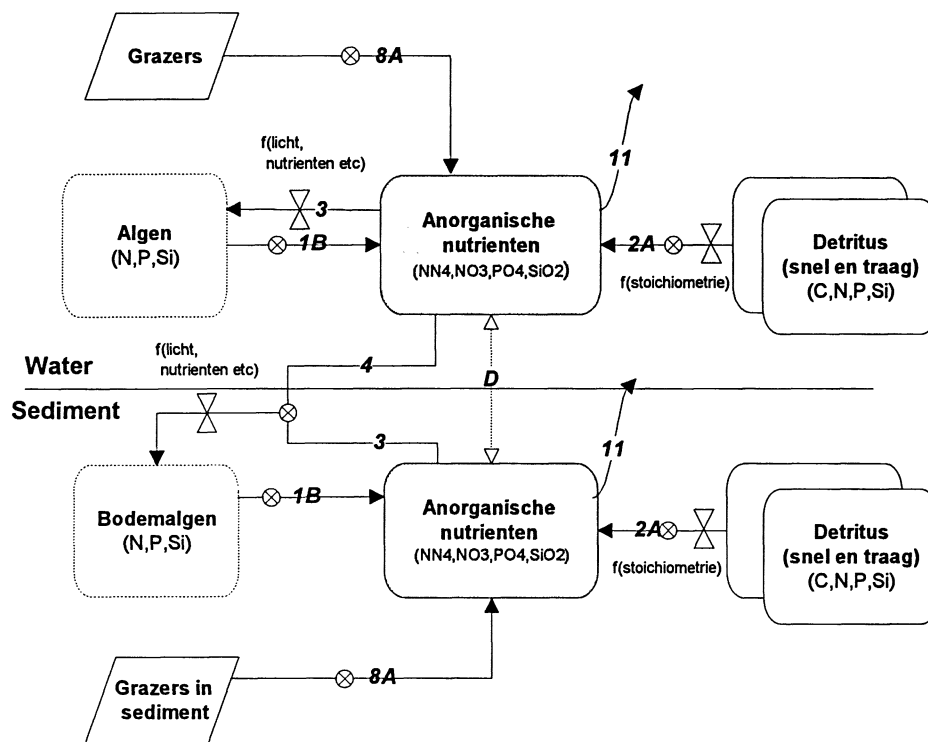
4.4.1 Nutriënten

Met betrekking tot de nutriënten worden alle gangbare, in diverse modellen beschouwde processen opgenomen. Deze zijn:

- opname van nutriënten door fytoplankton en microfytobenthos;
- afgifte van nutriënten door fytoplankton en microfytobenthos door respiratie en door autolyse bij sterfte;
- doorgave van organisch gebonden nutriënten via de voedselketen naar detritus;
- mineralisatie van nutriënten N en P in de diverse detritus fracties
- oplossen van opaal silicaat;
- nitrificatie;
- denitrificatie;
- fosfaatsorptie aan slib;
- precipitatie en oplossen van fosfaat;
- bezinking en resuspensie van geadsorbeerd fosfaat;
- bezinking en resuspensie van opaal silicaat;
- bezinking en resuspensie van nutriënten N en P in detritus; en
- diffusieve teruglevering van opgeloste nutriënten door de bodem.

De samenhang van de processen is weergegeven in figuren 4.1-4. Fluxen zijn hierin en in formuleringen gedefinieerd als met processen samenhangende massastromen in $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{dag}^{-1}$.

Ten aanzien van de opname van nutriënten in fytoplankton zullen twee alternatieven ontstaan, die samenhangen met de twee opties voor de fytoplanktonmodellering (zie paragraaf 4.4.2). Vanuit de nutriënten bezien is er echter geen verschil, aangezien de parameters die de opname- en autolysefluxen bevatten uniek zijn en afhankelijk van de gekozen optie van waarden worden voorzien vanuit een van de twee subroutines voor primaire productie.



LEGENDA

Nummering van processen

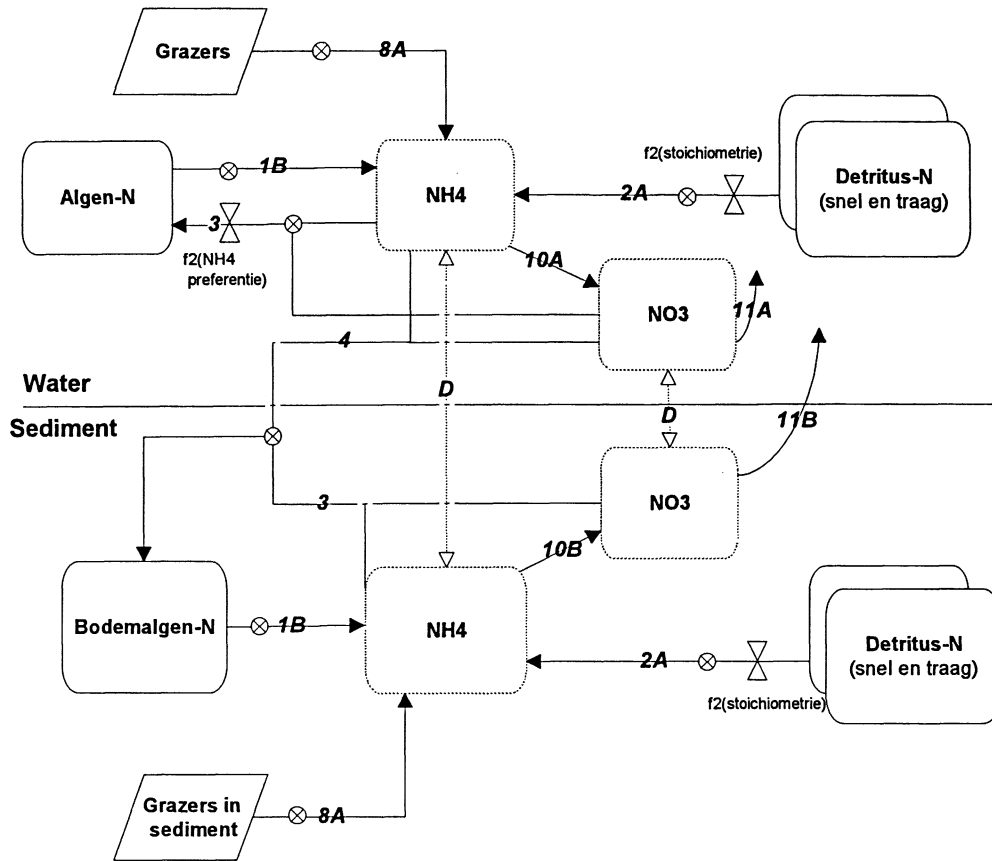
- 1 Mortaliteit algen
 - 1A detritusvorming
 - 1B autolyse
- 2 Mineralisatie detritus
 - 2A vorming nutriënten
 - 2B vorming part. org. stof
 - 2C vorming opg. org. stof
- 3 Netto opname nutriënten door algen
- 4 Netto opname nutriënten waterkolom
- 5 Graas zoöplankton en zoöbenthos
 - 5A graas op algen
 - 5B graas op detritus
- 6 Sedimentatie en mortaliteit algen
- 7 Resuspensie en mortaliteit bodemalgen
- 8 Mortaliteit grazers
 - 8A vorming nutriënten
 - 8B vorming detritus
- 9 Vorming detritus door mort. grazers
- 10 Nitrificatie
- 11 Denitrificatie
- 12 Adsorptie en desorptie fosfaat
- 13 Precipitatie en oplossen fosfaat
- 14 Oplossen van opaal silica

Lettercode voor stoftransport

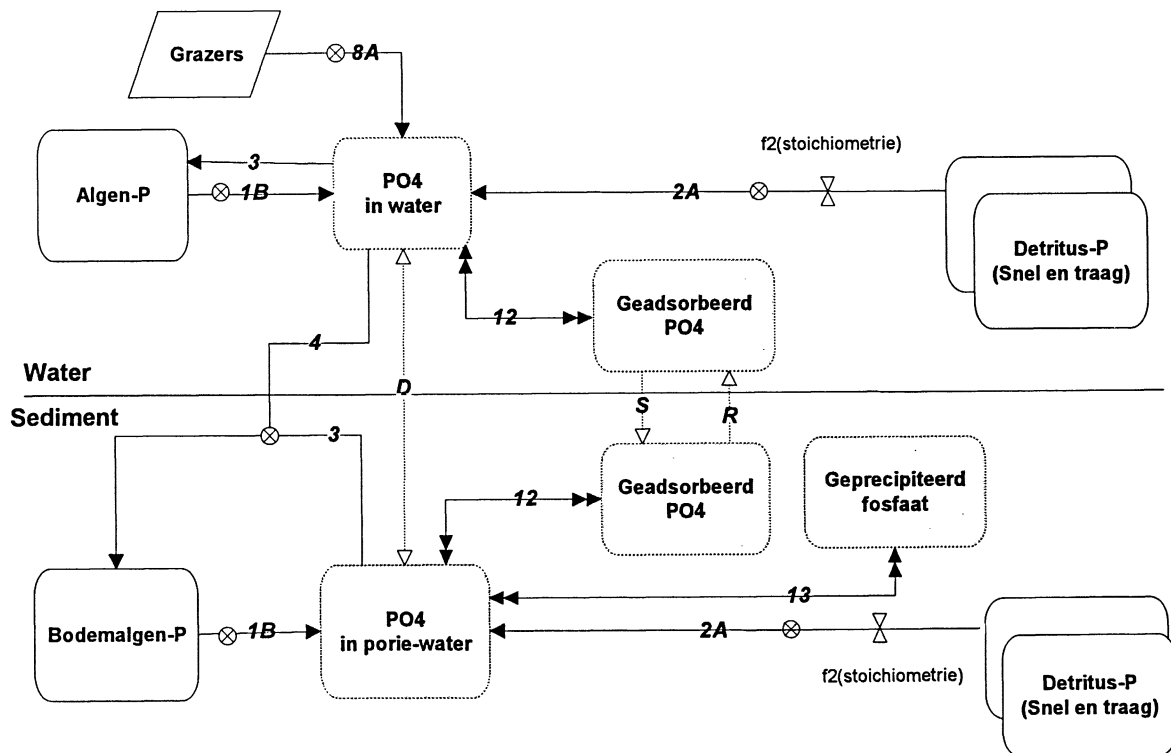
- S Sedimentatie
- R Resuspensie
- D Diffusie
- B Begraving

- opgeloste toestandvariabele ()
- toestandvariabele (particulair)
- forcing function (constant, f(plaats), f(tijd), f(plaats,tijd))
- \longrightarrow standaard 1e-orde flux
- \dashrightarrow transportflux (sedimentatie, resuspensie, diffusie)
- $\otimes \longrightarrow$ flux met verdeling over meerdere state variabelen
- $\bowtie \longrightarrow$ functie f2 (proces bepalende parameter)
- \dashrightarrow gecombineerde transport en (bio)chemische flux
- \longrightarrow chemische flux (oplossen, precipiteren, adsorberen)

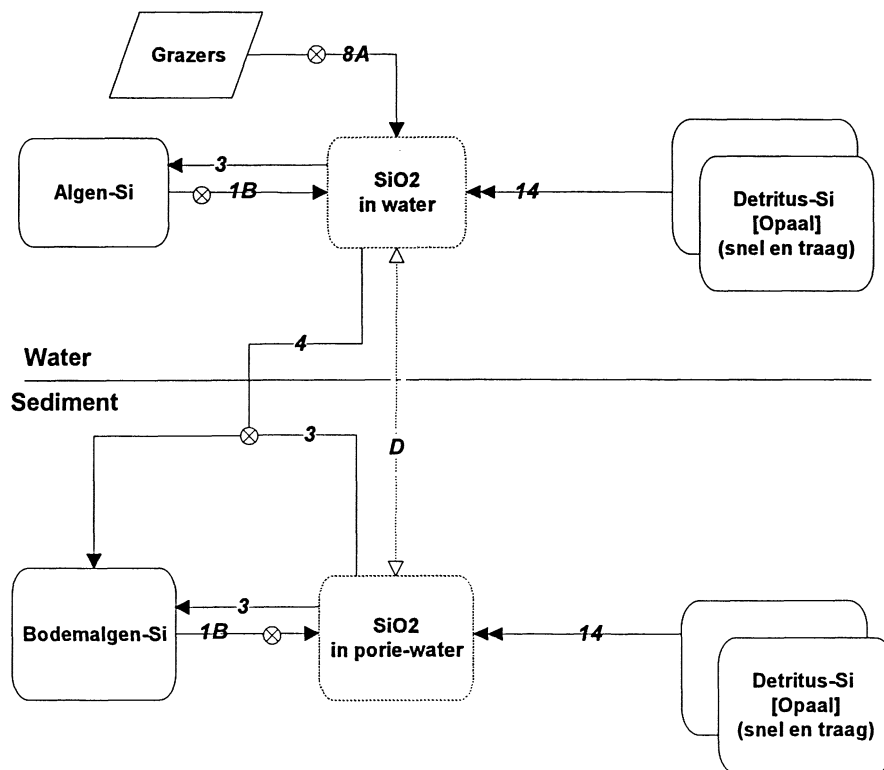
Figuur 4.1 De processen in de nutriëntenkringloop van het GEM in grote lijnen



Figuur 4.2 De processen in de stikstofkringloop van het GEM (zie legenda figuur 4.1)



Figuur 4.3 De processen in de fosfaatkringloop van het GEM (zie legenda figuur 4.1)



Figuur 4.4 De processen in de siliciumkringloop van het GEM (zie legenda figuur 4.1)

Gegeven de implementatie van het pilot- GEM in DELWAQ 4, wordt voor de formulering van de omzettingprocessen in sterke mate aangesloten bij de daarin voor de waterkolom gehanteerde generieke formulering (WL, september 1995). Deze luidt:

$$F = k_0 + f_1 \cdot f_2 \cdot k_1 \cdot kt^{(T-20)} \cdot C \quad (4.1)$$

waarin:

C = concentratie van de omgezette stof ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$)

F = procesflux ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{dag}^{-1}$)

f_1 = functie van de kritische temperatuur T_c waaronder een proces een constante 'achtergrondssnelheid' aanneemt ($f_1 = 1$ voor $T > T_c$, 0 voor $T \leq T_c$), welke ook gelijk aan nul kan zijn (-)

f_2 = functie van een proces bepalende parameter, bijvoorbeeld een concentratie waarboven een proces volledig en waaronder een proces vertraagd of in het geheel niet verloopt, maar f_1 kan ook de constante waarde 1 hebben (-)

k_0 = nulde orde snelheidsconstante ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{dag}^{-1}$)

k_1 = eerste orde snelheidsconstante (dag^{-1})

kt = temperatuurscoëfficiënt (-)

T = watertemperatuur ($^{\circ}\text{C}$)

Sorptie van fosfaat wordt op basis van evenwicht beschouwd. De sorptiesnelheid is gedefinieerd als het verschil tussen de evenwichtsconcentraties aan het begin en het eind van een tijdstap, gedeeld door de tijdstap. Er wordt rekening gehouden met verzadiging. Het evenwichtsgehalte wordt berekend met een pH-afhankelijke partiticoëfficiënt. De bestaande DELWAQ 4 routine zal worden aangepast.

De bezinking en resuspensie van nutriënten wordt berekend met formuleringen conform het gedrag van slib (zie paragraaf 4.4.5), dat wil zeggen er kan desgewenst rekening worden gehouden met kritische schuifspanningen. Voor eenvoudiger toepassingen kunnen deze zo gekozen worden, dat de formuleringen overgaan in netto bezinking met een constante bezinksnelheid. Ook in dit geval zullen bestaande DELWAQ 4 routines moeten worden aangepast.

De diverse beschikbare modules voor de beschrijving van de processen in de bodem vertonen een sterke mate van overeenkomst met betrekking tot de aard en de samenhang van de afzonderlijke processen enerzijds en de (chemische) gelaagdheid van de bodem anderzijds. De vorm en uitwerking vertonen echter verschillen. Deze betreffen de steady-state benadering versus de dynamische benadering (en tussenvormen daarvan), het reken-algorithme en in beperkte mate de procesformuleringen. De twee meest van elkaar verschillende berekeningswijzen worden als opties in het pilot-GEM opgenomen, evenals een sterk vereenvoudigde module voor toepassingen, waarbij de bodemprocessen geen dominante rol spelen. Zo ontstaan de volgende drie opties:

- eenvoudige formulering met een vrij te kiezen aantal bodemlagen, waarbij opgeloste, anorganisch particulaire (P en Si) en organische componenten (N en P) worden onderscheiden (verbetering van bestaande routines is nodig);
- formulering op basis van bodemmodule SWITCH met steady-state beschouwing voor electron-acceptoren en met vier lagen, waarbij naast geadsorbeerd fosfaat ook geprecipiteerd fosfaat wordt onderscheiden (reeds onder DELWAQ 4 beschikbaar);
- formulering op basis van de bodemmodule van ERSEM met steady-state schatting van dynamische profielen en met drie lagen, waarbij eveneens geprecipiteerd fosfaat wordt onderscheiden (aan DELWAQ 4 toe te voegen). Bezien dient te worden in hoeverre een synthese van de ERSEM-module en een nieuwe bij NIOO-CEMO in ontwikkeling zijnde module kan worden gemaakt.

Voorziene uitbreidingen

Met betrekking tot processen en procesformuleringen bestaan een aantal wetenschappelijke controverses, welke er in belangrijke mate de oorzaak van zijn dat op onderdelen de bovengeschetste opties zullen worden geïmplementeerd. Zo gaat de voorkeur uit naar het opnemen van één module voor de bodemprocessen. Dat is echter momenteel niet mogelijk. In de toekomst zal naar integratie van de opties worden toegewerkt.

Het optreden van denitrificatie in de waterkolom bij overwegend aerobe omstandigheden is onderwerp van onderzoek bij NIOO-CEMO. Na aantonen van dit proces zal het in de toekomst in het GEM worden opgenomen.

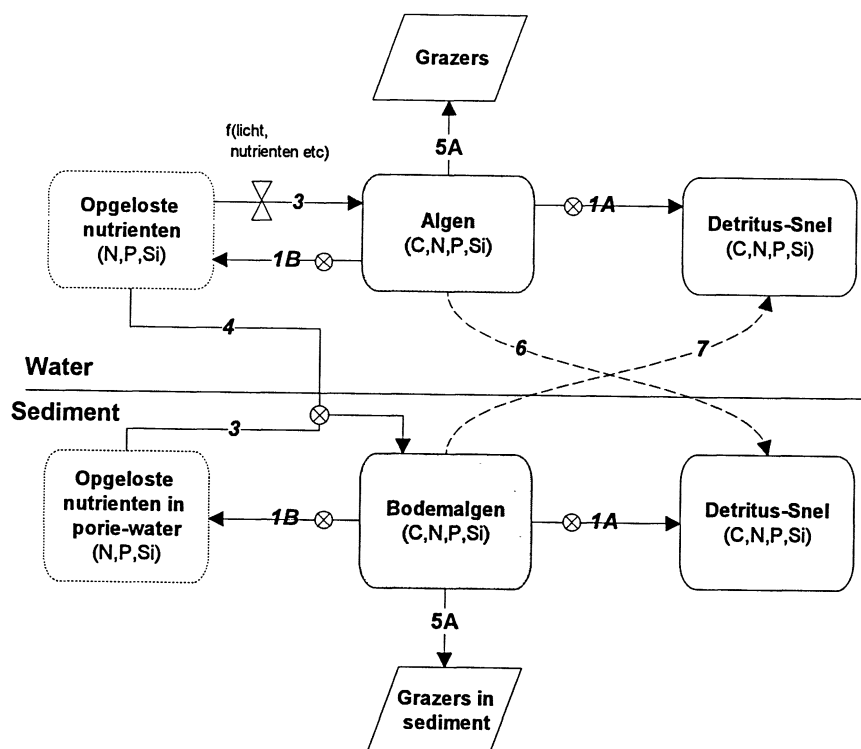
Om gevallen met zeer korte verblijftijden exacter te kunnen modelleren zou overwogen kunnen worden een kinetische sorptie-routine als optie aan het model toe te voegen.

4.4.2 Primaire producenten

Fytoplankton

De module voor fytoplankton moet verschillende soorten of groepen simultaan beschrijven, waarbij een aantal eigenschappen kunnen variëren. Van de nu beschikbare modules voldoet BLOOM het beste aan de gewenste functionaliteit. Deze module is bovendien al beschikbaar binnen de DELWAQ omgeving. BLOOM zal daarom als (optionele) module in het pilot-GEM worden opgenomen.

Bij een aantal instituten bestaat de wens een andersoortige fytoplankton module te kunnen gebruiken. Daarom zal naast BLOOM een Monod-type module worden ingebouwd. Vele voorbeeld-modules zijn beschikbaar (MOSES, SMOES, ECOWASP, DELWAQ), maar deze voldoen voor zover nu bekend geen van allen volledig aan de gewenste functionaliteit c.q. de gewenste generieke benadering. De verschillen tussen modules beperken zich niet tot de nutriëntenkinetiek. Er zijn ook verschillen in de manier waarop de licht-afhankelijkheid wordt gemodelleerd. Het potentiële effect hiervan is groot zodat met dit aspect rekening moet worden gehouden bij de uiteindelijke keuze van formuleringen.



Figuur 4.5 De processen in de kringloop van de primaire producenten in het GEM (zie legenda figuur 4.1)

Een bijzonder probleem wordt gevormd door de zoet-zout gradiënt in sommige systemen zoals de Westerschelde. Hierdoor is het gewenst zoet- en zoutwater soorten simultaan te modelleren. Algensoorten, die in een gebied terecht komen met een voor hen ongewenste saliniteit, zullen versneld afsterven. Ervaringen met onder andere SAWES hebben aangetoond dat deze functionaliteit zo belangrijk is voor het systeemgedrag dat opname in het pilot-GEM noodzakelijk is.

De nieuwe fytoplankton-module zal qua formuleringen de generieke versie van de bestaande modules worden, waarmee maximaal zes groepen fytoplankton gemodelleerd kunnen worden en waarin dynamische stoechiometrie is geïmplementeerd. De op te nemen processen omvatten:

- groei (bruto primaire productie);
- respiratie;
- excretie;
- sterfte; en
- begrazing.

Figuur 4.5 geeft een schematisch overzicht van de processen in de kringloop van de primaire producenten, zoals deze in het pilot-GEM is toegesneden op fytoplankton en microfytobenthos.

De processen zijn alle temperatuur-afhankelijk. De bruto primaire productiesnelheid wordt beschreven met:

$$F_p = k_{\max} \cdot f_{\text{nut}} \cdot f_{\text{licht}} \cdot f_{\text{temp}} \cdot f_{\text{par}} \cdot C_{\text{fyt}} \quad (4.2)$$

waarin:

C_{fyt} = concentratie van fytoplanktonsoort ($\text{g} \cdot \text{m}^3$)

F_p = biomassaflux ($\text{g} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{dag}^{-1}$)

f_{nut} = het minimum van de diverse nutriëntbeperkingen (-)

f_{licht} = de lichtbeperking (-)

f_{temp} = functie van de temperatuur (-)

f_{par} = beperking door overige omgevingsfactoren zoals zeer laag zuurstofgehalte (-)

k_{\max} = maximale productiesnelheid ($\text{g} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{dag}^{-1}$)

De functionele verbanden en hun onderlinge samenhang dienen nader te worden vastgesteld. De formulering van de nutriënten functie kan gebaseerd zijn op de minst voorradige nutriënt of versterking van de limitatie in het geval dat meerdere nutriënten uitgeput raken. Ook zal het effect van heterotrofie worden ingebouwd. Effecten van parameters die de mortaliteit beïnvloeden, de saliniteit in het bijzonder, zullen in de formulering van de sterftesnelheid worden opgenomen.

De aspecten van zuurstofbeperking, heterotrofie en saliniteitssterfte dienen voor de vergelijkbaarheid van de beide fytoplankton-modules ook in BLOOM worden ingebouwd. Dit kan vrij eenvoudig tot stand worden gebracht door de procesroutines van de maximale productiesnelheid en de sterftesnelheid aan te passen.

Microfytobenthos

De nieuw te maken module voor microfytobenthos wordt gebaseerd op een generieke combinatie van formuleringen van MOSES en het Eems-Dollard model. De modellering van microfytobenthos kent nogal wat open einden, met name ten aanzien van limiterende factoren en begrazing. De eerste versie van de microfytoplankton-module dient daarom eenvoudig van formulering te zijn. De mee te nemen processen komen echter overeen met die voor fytoplankton.

Voorziene uitbreidingen

De voorkeur gaat uit naar het opnemen van één module voor fytoplankton. Dat is echter momenteel niet mogelijk. In de toekomst zal naar integratie van de opties worden toegewerkt.

De microfytobenthos-module zal worden verbeterd en uitgebreid, naarmate onderzoek meer inzicht in het gedrag van microfytobenthos en de sturing vanuit de omgeving levert.

Het GEM zal bij gelegenheid worden uitgebreid met macrofyten. Er wordt aan gedacht om aanvankelijk te volstaan met 'forcing functions' voor soorten als *Ulva* en *Zostera Marina*. In een later stadium kan voor *Zostera* worden aangesloten bij modelontwikkeling in het kader van het EUMAC-project, voor *Ulva* op de wat kortere termijn bij de modellering in ECOLUMN en DBS.

4.4.3 Primaire consumenten

De consumenten 'zoöplankton' en 'suspensieëters' worden als forcing functies opgenomen. Dit impliceert het opnemen van de huidige binnen DELWAQ beschikbare grazers-module, waarmee de effecten van een groot aantal zoöplankton en mosselsoorten door middel van forcing functions simultaan kunnen worden beschouwd. De module beschouwt:

- maximale filtratiesnelheden;
- temperatuurafhankelijkheid van de filtratiesnelheid;
- factoren voor voedselvoorkeuren;
- de omvang van faecale fracties;
- de nutriëntopname en afgifte door grazers in diverse detritusfracties; en
- controle op de draagkracht ten aanzien van de opgelegde grazerbiomassa.

Voorziene uitbreidingen

De wens bestaat om zoöplankton en benthische suspensieëters (maar ook andere relevante soorten) in het uiteindelijke GEM door middel van een biomassa model op te nemen naast forcing functies. Vanuit de beleidsoptiek geredeneerd, kan het noodzakelijk zijn om een leeftijd of lichaamsgewicht gestructureerd model toe te passen. Onderzocht moet worden of het mogelijk is deze twee typen modellen te combineren. Tevens moet nog worden bepaald, op welke wijze en in welke mate de diverse soorten kunnen worden samengenomen.

De benthische sedimenteters (meiofauna maar ook bacteriën) zullen in het GEM impliciet worden gemodelleerd. Dat wil zeggen dat hun invloed zal worden geparаметeriseerd via daarvoor geëigende snelheidsconstanten voor mineralisatie. Dit is vooralsnog onvermijdelijk, omdat voor expliciete modellering de benodigde proceskennis deels ontbreekt. Wel kan getracht worden de afbraaksnelheid te relateren aan de populatie en dynamiek van de suspensieëters.

4.4.4 Organische stof

De modellering van organische stof in levende organismen wordt gedekt door de modules voor producenten en consumenten. Deze bevatten sterfte-termen welke leiden tot de productie van detritus, dat wil zeggen dood organisch materiaal. Delen van het detritus worden geconsumeerd en daarbij afgebroken en in biomassa of een andere vorm van detritus omgezet.

De afbraak van het detritus door bacteriën zal in het pilot-GEM in de waterkolom verlopen in meerdere stappen. Het detritus dat wordt aangevoerd vanuit de primaire producenten wordt relatief snel afgebroken. Dit verse detritus wordt daarbij gedeeltelijk omgezet in een detritusfractie, waarvan de afbraak relatief traag verloopt. In een tweede mineralisatiestap wordt de traag afbreekbare detritusfractie gedeeltelijk omgezet in refractair opgelost en particulier organisch materiaal. Geloosde organische stof, bijvoorbeeld aangevoerd door rivierwater, kan naar behoefte worden toegevoerd aan de diverse organische stoffracties. De samenhang van de processen in de kringloop van organische stof in het pilot-GEM blijkt uit figuur 4.6

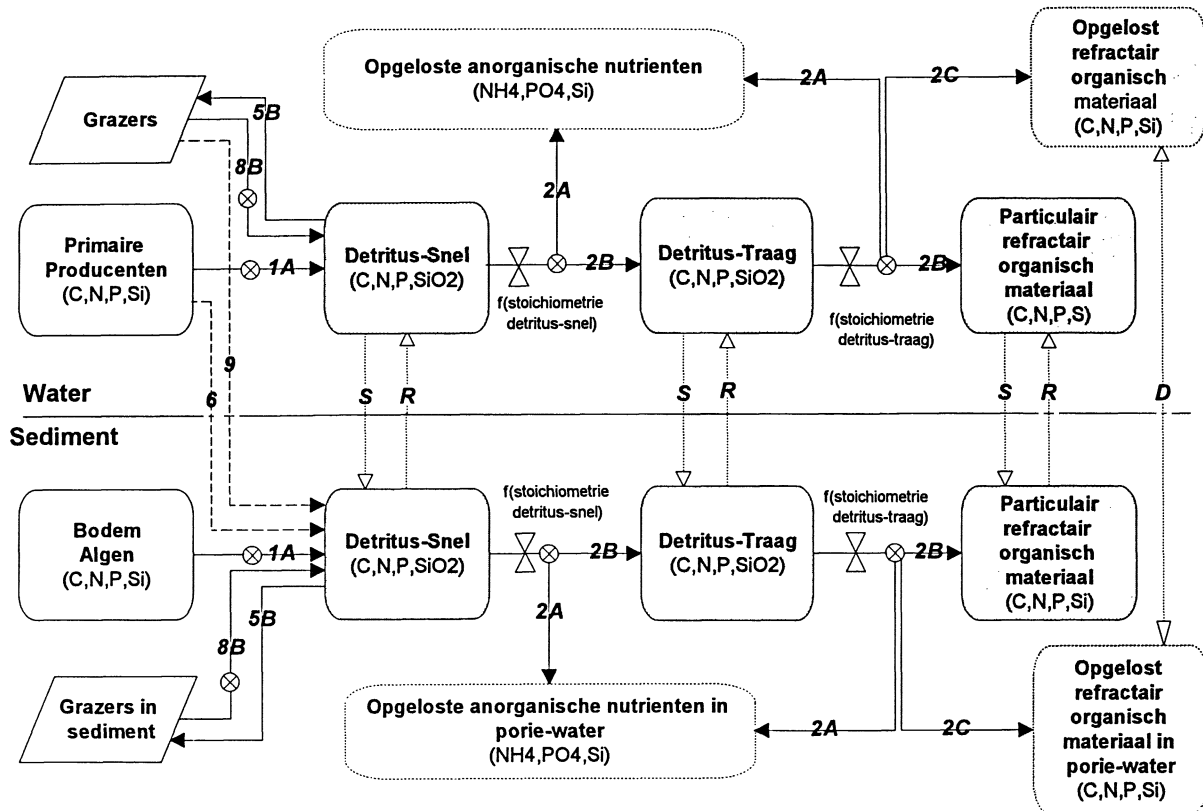
De afbraakprocessen zijn geformuleerd conform vergelijking 4.1, met dien verstande dat de afbraaksnelheid een functie is van de nutriënten stoechiometrie. Deze getrapte afbraak is nieuw voor DELWAQ. De bestaande routines zullen dus moeten worden aangepast c.q. aangevuld met nieuwe procesroutines.

Detritus is ook onderhevig aan bezinking en resuspensie, processen die zoals reeds gezegd, analoog aan het slibgedrag worden geformuleerd.

Alle detritus dat in de bodem terecht komt gaat deel uitmaken van een relatief snel afbrekende bodemdetritusfractie en wordt daar ook weer in twee stappen afgebroken en uiteindelijk voor een deel omgezet in refractair materiaal. De wijze waarop dit wordt afgehandeld zal mogelijk enigszins verschillen voor de drie alternatieve bodemmodules. In SWITCH heeft de afbraaksnelheid bijvoorbeeld een relatie met de laag, waarin het detritus zich bevindt. In essentie komen de modules echter overeen.

Voorziene uitbreidingen

Uitbreidingen zullen waarschijnlijk alleen betrekking hebben op de toevoeging van andere primaire producenten en consumenten en hun detritus productie dan wel consumptie. Het lijkt vooralsnog niet nodig om het aantal detritusfracties verder te laten toenemen.



Figuur 4.6 De processen in de kringloop van organische stof in het GEM (zie legenda figuur 4.1)

4.4.5 Overige stoffen

Met aanzien van zuurstof, slib en chloride worden alle gangbare, in modellen beschouwde processen opgenomen. Gezien de implementatie van het pilot-GEM in DELWAQ 4, worden de daarin beschikbare formuleringen van processen gebruikt. Enige aanpassing van het model zal nodig zijn voor zuurstof, omdat het aantal mineralisatieprocessen wordt uitgebreid. De op te nemen zuurstof-gerelateerde processen zijn:

- reaeratie;
- consumptie van zuurstof door mineralisatieprocessen in water en bodem;
- productie van zuurstof door primaire productie van fytoplankton en microfytobenthos; en
- consumptie van zuurstof door primaire consumenten.

Voor slib houdt de formulering volgens DELWAQ 4 in dat deze voor sedimentatie en resuspensie (erosie) gebaseerd is op kritische schuifspanningen aan het water-bodem grensvlak. De processnelheden nemen toe of af (tot de waarde nul) naarmate kritische waarden verder worden overschreden of dichter worden benaderd. De kritische schuifspanning voor erosie is verschillend voor de toplaag van het sediment en de zich daaronder bevindende laag. (De bovenlaag kan worden uitgeput!). De schuifspanning is een functie van windgolven, windgedreven stroming en stroming onder verhang.

Voorziene uitbreidingen

Uitbreidingen zullen van zeer beperkte aard zijn, en kunnen bijvoorbeeld betrekking hebben op de toevoeging van gereduceerde stoffen, die gevormd worden bij afwezigheid van zuurstof en die traag oxyderen wanneer er weer zuurstof beschikbaar is. In de huidige modelopzet kan gerekend worden met negatieve zuurstofconcentraties, welke de gereduceerde stoffen vervangen.

Op de wat langere termijn behoort verbetering en aanscherping van de slibmodellering tot de mogelijkheden.

4.5 Stoftransport en schematisatie

Uitgangspunten

Bij de berekening van het stoftransport wordt uitgegaan van opgelegde waterbeweging, welke off-line is berekend met behulp van geëigende hydrodynamische modellen. Afhankelijk van de aard van de modeltoepassing en de mogelijkheden binnen GEM kan de waterbeweging getij-gemiddeld (met reststroom) dan wel getij-oplossend aan GEM worden aangeboden. Een koppelingsinstrument is nodig voor aggregatie van de berekende waterbeweging over ruimte en tijd. De gewenste flexibiliteit en brede toepasbaarheid van het GEM impliceren dat er:

- naar keuze compartimenten in één of twee horizontale dimensies kunnen worden onderscheiden;
- meerdere verticale compartimenten onderscheiden moeten kunnen worden in relatie tot stratificatie en gelaagd voorkomen van specifieke organismen;
- meerdere bodemcompartimenten onderscheiden moeten kunnen worden; en
- uitwisseling tussen bodemcompartimenten en watercompartimenten via een uitwisselingsmatrix gedefiniëerd moet kunnen worden.

De wijze van koppeling met de bodemcompartimenten dient uiteindelijk los te staan van de geografische positie. Dit maakt het gebruik van een 'moving reference frame' mogelijk. Voorts moet zowel getij-gemiddeld als getij-oplossend gerekend kunnen worden. In DELWAQ zijn dergelijke opties in principe allemaal mogelijk, zodat ze in het GEM gerealiseerd kunnen worden. Aan het pilot-GEM worden echter om pragmatische redenen beperkingen gesteld. De 'moving frame' koppeling van bodemcompartimenten, 3-D simulatie en getij-oplossend rekenen zullen naar verwachting nog niet tot de mogelijkheden van het pilot-GEM behoren. Wel dient hiermee bij de ontwikkeling rekening te worden gehouden.

De schematisatie in het GEM moet uiteindelijk naar keuze 1-D, 2-D of 3-D kunnen zijn, qua fijnheid van grid zo dicht mogelijk bij de voor waterbeweging benodigde schematisatie. Verondersteld wordt dat de waterbeweging beschikbaar is op een fijn grid, waarin zowel geulen en platen herkenbaar zijn en waarmee de waterbeweging onder invloed van rivierafvoer, getij, wind en dichtheidsverschillen in voldoende mate van detail kan worden berekend. Het type schematisatie (rechthoekig, kromlijng, sigma transformatie, eindige elementen, etc.) is niet van wezenlijk belang. Criteria waaraan het waterbewegingsmodel moet voldoen, betreffen o.a.:

- een schematisatie waarin gridcellen met een eigen volume kunnen worden onderscheiden, alsmede uitwisselingsoppervlakken met aangrenzende cellen; en
- per tijdstap wegschrijven van volumes, uitwisselingsoppervlakken, uitwisselingsdebieten per gridcel, waarbij wordt voldaan aan massabehoud per gridcel (volumeverandering per gridcel is gelijk aan het verschil van debieten van in- en uitstroming).

De rekenlast kan zeer omvangrijk worden als hoge nauwkeurigheid wordt nagestreefd door middel van een fijn grid en een kleine tijdstap. Om deze te beperken zal het GEM worden voorzien van algoritmen om tussen de stoftransportstap en de ecologische processenstap te (dis)aggregeren in ruimte en tijd. Zo ontstaat bovendien de mogelijkheid om naar behoefte te verfijnen of op te schalen, afhankelijk van het stadium en het doel van de modeltoepassing. Een calibratie kan eerst grof en daarna fijn gedaan worden, of een gedetailleerde onderzoektoepassing kan worden opgeschaald ten behoeve van 'snel' gebruik door beleidsmedewerkers.

Bij de ontwikkeling van wijzen van (dis)aggregatie wordt ernaar gestreefd om:

- de beschikbare kennis van hydrodynamica zoveel mogelijk mee te kunnen nemen in transport van stoffen en organismen;
- rekentechnisch zodanig te aggregeren dat de toepassing van het ecologische model niet (onnodig) geremd wordt door te veel detail van waterbeweging en transportprocessen;
- de nauwkeurigheid van transportprocessen op adequaat niveau voor berekening over grote tijdschalen te brengen (geen accumulatie van fouten); en
- eenvoudige definiëring en aansturing van verschillende aggregatie-niveaus en de koppeling daarvan mogelijk te maken (flexibele toepassing).

Mogelijkheden voor (dis)aggregatie

Voor (dis)aggregatie worden de volgende mogelijkheden voorzien:

- 1) Aggregatie vindt plaats op basis van off-line waterbeweging, waarbij stoftransport, waterkwaliteitsprocessen en ecologische processen simultaan op hetzelfde grid worden berekend.
- 2) Stoftransport en processen worden serieel met verschillende tijdstap afgehandeld.
- 3) Tussen stoftransport en processen vindt ruimtelijke (dis)aggregatie plaats.
- 4) Stoftransport wordt off-line geïntegreerd over het getij.
- 5) Stoftransport wordt off-line geïntegreerd over het getij, ruimtelijke (dis)aggregatie vindt plaats voor de processen (combinatie van 3 en 4).

De volgorde van de opties weerspiegelt bij benadering de prioritering ten aanzien van uitvoering. De beschikbare middelen zullen bepalen welk ontwikkelingsniveau in het pilot-GEM kan worden behaald. In de modeltoepassingen zoals die momenteel bij RIKZ en WL worden uitgevoerd, zijn reeds de volgende opties operationeel beschikbaar:

- aanmaken van een geaggregeerd grid als basis voor stoftransport- en waterkwaliteitsberekeningen (DIDO);
- koppelen van waterbewegingsresultaten en onderliggende gegevens aan een waterkwaliteitsmodel, waarbij zowel aggregatie in ruimte als tijd kan worden opgegeven (TRIWAQ/TRISULA en DELWAQ);
- geaggregeerd invoeren van proceskonstanten, forcing functies en fluxen (bijv. atmosferische depositie) (DELWAQ);
- ruimtelijk geaggregeerd modelleren van een complexe bodemmodule met koppeling aan het waterkwaliteitsgrid (bijv. DELWAQ-SWITCH); en
- ontkoppelen van transporttijdstap en processtap voor specifieke groepen processen (bijv. DELWAQ-BLOOM).

Mogelijkheden 1 en 2 zijn dus in essentie reeds in DELWAQ gerealiseerd. In het onderstaande worden de mogelijkheden besproken.

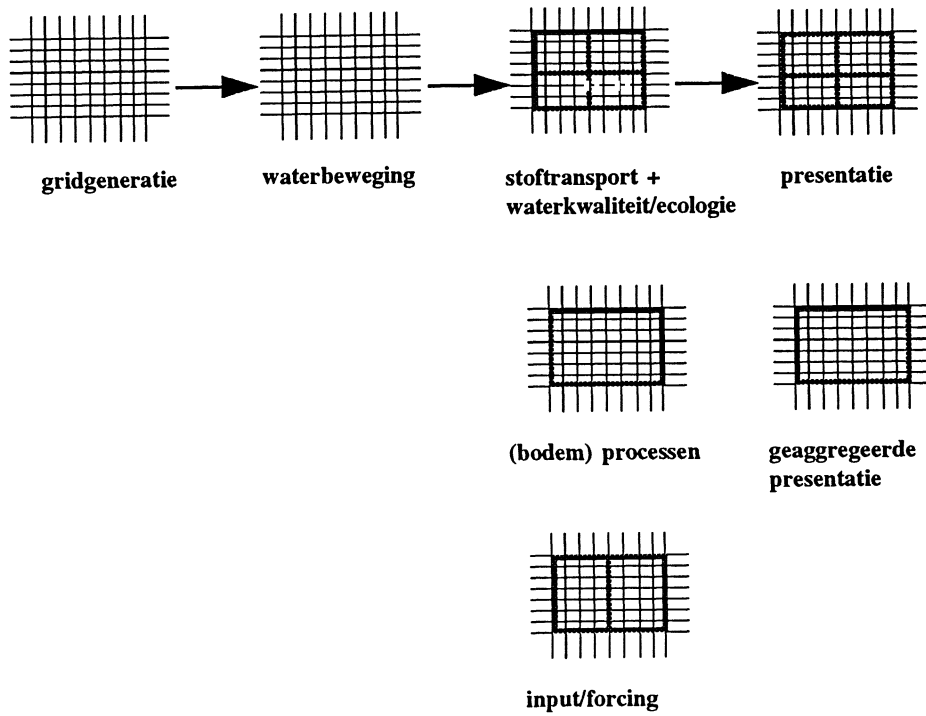
1) Stoftransport en processen simultaan op hetzelfde grid met geaggregeerde waterbeweging

De ecologische modellering op basis van over ruimte en tijd geaggregeerde waterbeweging is reeds mogelijk met behulp van DELWAQ en koppelingsprogrammatuur. Het geaggregeerd grid is daarbij opgebouwd uit cellen die samengesteld zijn uit een aantal gehele gridcellen van de waterbeweging (zie figuur 4.7). Echter, om eenvoudiger gebruik te kunnen maken van geaggregeerde grids en tijdstappen is het noodzakelijk om de bestaande mogelijkheden te stroomlijnen. Benodigde activiteiten betreffen de verbetering van:

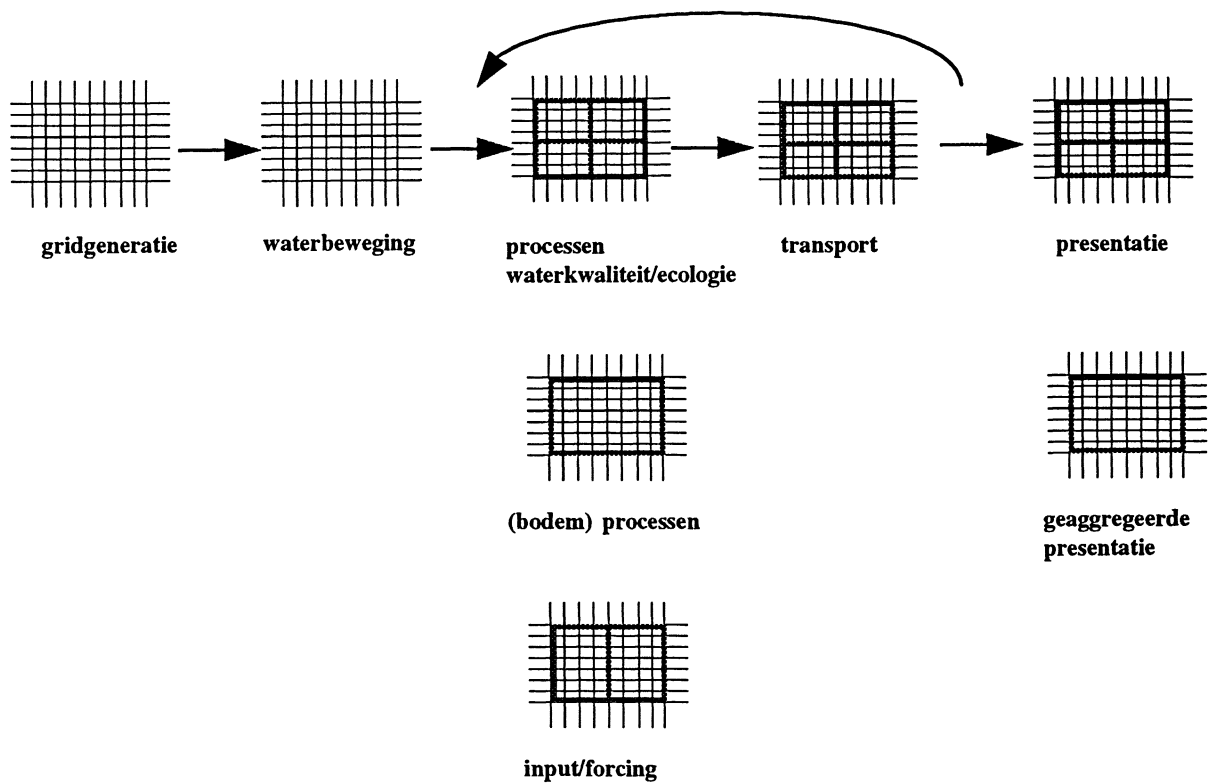
- DIDO op onderdelen (o.a. methoden voor aggregatie, uitvoer, controle);
- de koppeling tussen waterbeweging en stoftransport (o.a. aggregatie in de tijd, toets en eventuele correctie op volumebehoud);
- de aansturing van en interactie tussen verschillende gridniveaus; en
- de mogelijkheden voor (dis)aggregatie voor de presentatie van resultaten.

2) Stoftransport en processen serieel met verschillende tijdstap

In het verlengde van mogelijkheid 1 is het mogelijk om voor het stoftransport en de processen een ont koppeling toe te passen waardoor de respectievelijke berekeningen met verschillende tijdstappen kunnen worden uitgevoerd (zie figuur 4.8). Dit kan een belangrijke verbetering in de rekentijd tot gevolg hebben indien bijvoorbeeld de tijdstap van het transport uit numerieke overwegingen klein moet blijven ten opzichte van de proceskinetiek. De ont koppeling van processen en transport is reeds mogelijk in DELWAQ, maar ook hiervoor geldt dat een aantal verbeteringen gewenst zijn met betrekking tot de aansturing. De hiermee gemoeide inspanning is gering.



Figuur 4.7 Schematisatie en berekeningsprocedure in het geval van (dis)aggregatie volgens mogelijkheid 1



Figuur 4.8 Schematisatie en berekeningsprocedure in het geval van (dis)aggregatie volgens mogelijkheid 2

3) *Stoftransport en processen op verschillende grids*

Voor systemen waarin de waterkwaliteitsprocessen en ecologische processen erg complex zijn en waarbij zowel voor de berekening als voor de presentatie van resultaten kan worden volstaan met een ten opzichte van de waterbeweging geaggregeerd grid, is het mogelijk om een methodiek te ontwerpen waarbij details van de waterbeweging en het bijbehorende stoftransport op het fijne grid toch worden meegenomen. Een dergelijke ontwikkeling is vooral van belang indien in bepaalde perioden op delen van het gebied het stoftransport een dominante invloed heeft op de concentraties en er voor deze situatie eigenlijk gerekend zou moeten worden op een fijn grid maar dit niet wenselijk is vanwege de complexiteit van de procesmodule.

In de voorgestelde methodiek wordt als volgt te werk gegaan (zie figuur 4.9). Uitgaande van een (initiële) concentratie verdeling op het fijne grid, wordt de verdelingsstructuur binnen een geaggregeerde gridcel in een aggregatiemodule vastgelegd. Vervolgens aggregeert deze module de concentraties tot gemiddelde concentraties voor het grid voor waterkwaliteitsprocessen en ecologische processen. Met het procesmoduul worden de concentratieveranderingen berekend. De disaggregatiemodule berekent hiermee op basis van de opgeslagen ruimtelijke verdelingen concentraties voor het fijne grid. Daarna kunnen transportfluxen en de eruit voortvloeiende concentraties worden berekend voor het fijne grid. Met dat resultaat vangt een nieuwe simulatiecyclus aan.

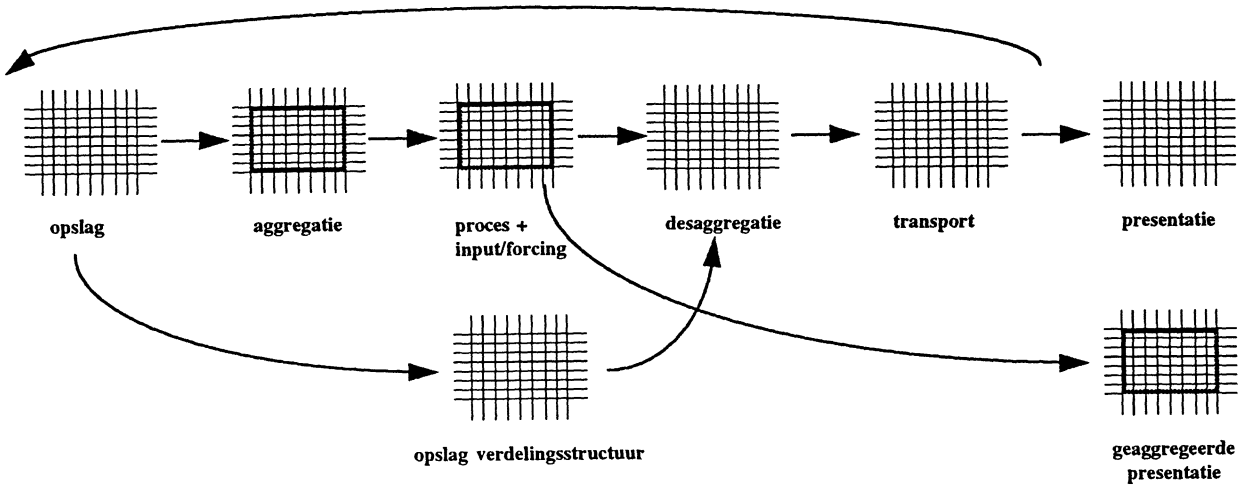
Voor implementatie van deze methodiek in DELWAQ moeten modules gemaakt worden voor aggregatie, voor disaggregatie, voor aansturing van de berekeningscyclus en voor uitvoer.

4 *Stoftransport off-line geïntegreerd over het getij*

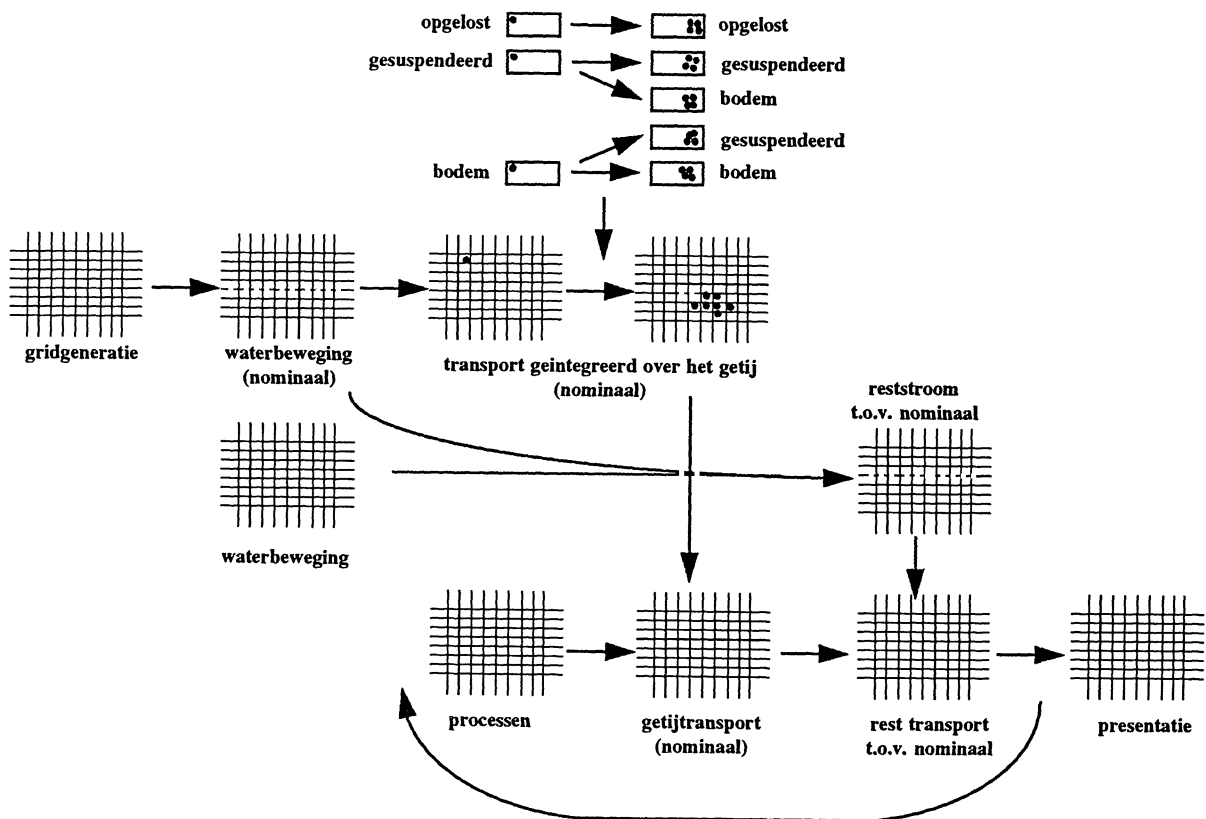
In een estuarien systeem wordt het transport veelal gedomineerd door de getijbeweging, terwijl het niet altijd noodzakelijk is om de intergetijdse variaties zichtbaar te maken. De onderstaande methode is dan ook vooral van toepassing voor situaties waarin:

- de rekentijd voor getij-oplossend transport relatief groot is ten opzichte van de rekentijd voor processen;
- over het getij-geïntegreerde resultaten volstaan;
- het transport kan worden gekarakteriseerd door een nominale hydrodynamische situatie (afvoer, wind, getij), die door middel van een toegevoegd transport kan worden gecorrigeerd voor afwijkende reststroom.

De voorgestelde methodiek kan als volgt worden gekarakteriseerd (zie figuur 4.10). De transportberekeningen met integratie over het getij vinden off-line plaats. Hierbij wordt per gridcel de verplaatsing van een eenheidsmassa naar andere gridcellen berekend. Deze bewerking dient gescheiden te worden uitgevoerd voor opgeloste stoffen en gesuspendeerde stoffen, omdat deze immers niet aan dezelfde transportvelden onderworpen zijn. Het een en ander resulteert in een aantal transport matrices gelijk aan tweemaal het aantal gridcellen in water en bodem. Integratie van het stoftransport met behulp van de matrices over de procestijdstap voert tot een nieuwe set concentraties waarmee de waterkwaliteitsprocessen en de ecologische processen kunnen worden doorgerekend.



Figuur 4.9 Schematisatie en berekeningsprocedure in het geval van (dis)aggregatie volgens mogelijkheid 3



Figuur 4.10 Schematisatie en berekeningsprocedure in het geval van (dis)aggregatie volgens mogelijkheid 4

Indien lange termijn (periode groter dan het getij) variaties in rivierafvoer, windgedreven stromen en/of dichtheidstromen het nominale transportbeeld kunnen verstoren is het mogelijk om een dergelijke verstoring op basis van afwijkingen in het reststroomveld mee te nemen. Hiertoe dient eerst het afwijkende reststroomveld te worden bepaald voor een aantal karakteristieke situaties.

In het kader van het MANS/KSENOS-project is voor de koppeling met SLIB3D van de Kuststookschematisatie een eerste toepassing gerealiseerd voor een over het getij-geïntegreerd transport van gesuspendeerde stoffen. Hierbij is tevens het transport van en naar de bodem in beschouwing genomen (zie appendix 1; RIKZ, 1995). De benodigde verdere ontwikkeling van de methodiek betreft:

- een module waarmee het off-line getij-transport per gridcel kan worden berekend en waarbij rekening wordt gehouden met het beperkte gebied waarin de massa van een gridcel na een integratie cyclus terecht kan komen;
- een transportmodule in DELWAQ waarmee het getijgeïntegreerde transport kan worden gebruikt voor de verspreiding van opgeloste stoffen;
- een module waarmee het mogelijk is om transport te corrigeren met een ten opzichte van de voor de nominale situatie berekende reststroom; en
- verbetering in de aansturing van het op deze wijze beschouwen van het transport in DELWAQ.

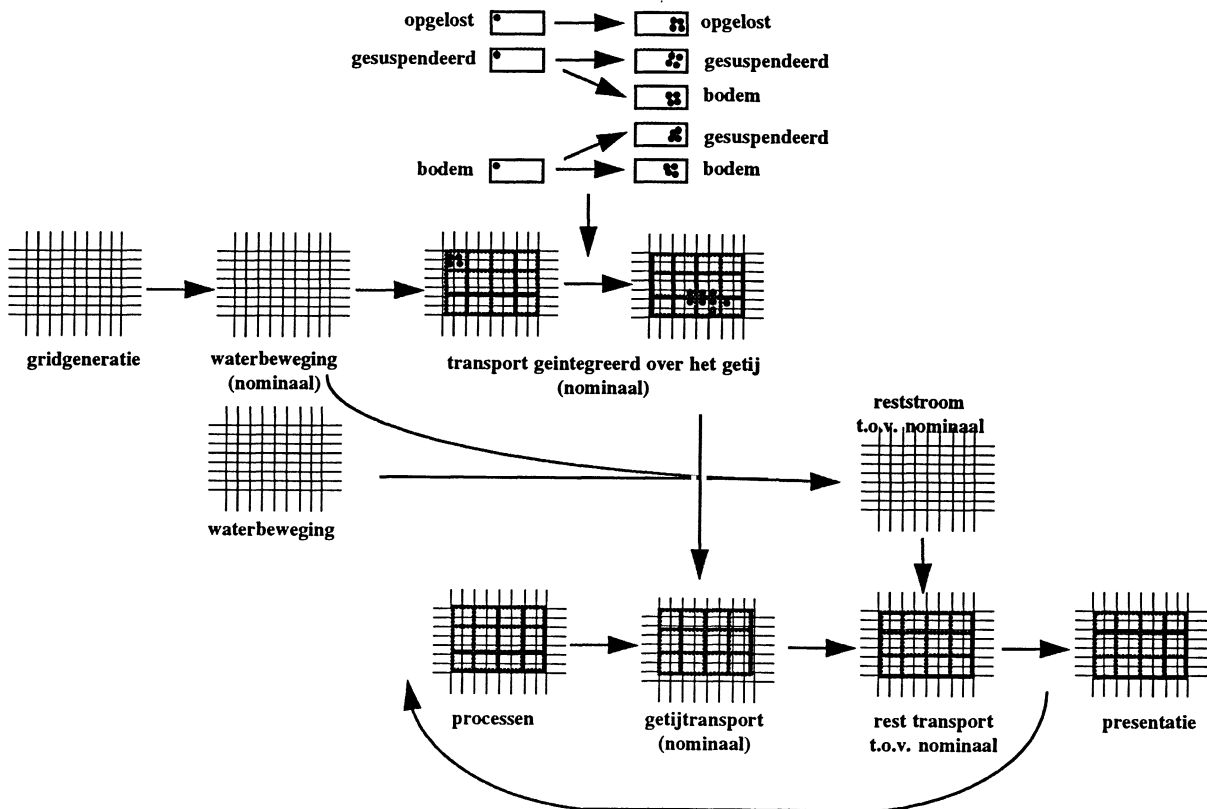
5 Stoftransport off-line geïntegreerd, processen ruimtelijk geaggregeerd

Een kleine aanpassing ten opzichte van mogelijkheid 4 is het incorporeren van de ruimtelijke aggregatie naar een grover grid voor waterkwaliteit en ecosysteem (zie figuur 4.11). Een dergelijke aanpak is in het MANS/KSENOS-project reeds toegepast en lijkt derhalve geen wezenlijk probleem te zijn. Specifiek dient aandacht te worden besteed aan verdere verbetering van de aansturing.

Voorziene uitbreidingen

Het pilot-GEM zal op den duur van een 2-D horizontale versie naar een 3-D versie moeten worden omgezet. Afhankelijk van voor de pilot-GEM gekozen (dis)aggregatieopties, zullen verdere verfijningen in het stoftransport moeten worden aangebracht ten behoeve van getij-oplossen rekenen en toepassing van een 'moving reference frame'.

De uitvoer van in te zetten waterbewegingsmodellen moet bij voorkeur in uniform format beschikbaar moeten komen. Een dergelijk uniform format zal moeten worden gedefinieerd. Aandacht dient daarbij ook te worden gegeven aan de randvoorwaarden vanuit (dis)aggregatie in ruimte en tijd.



Figuur 4.11 Schematisatie en berekeningsprocedure in het geval van (dis)aggregatie volgens mogelijkheid 5

4.6 Invoer

De invoer volgt logischerwijs uit de gekozen toestandsvariabelen, de bijbehorende procesformuleringen en de gekozen ruimtelijke schematisatie. In modellen wordt een grote variatie aan invoerfuncties (in de vorm van tijdseries) en parameters aangetroffen. De volgende categorieën zijn te onderscheiden:

- 1 forcing functies van functionele groepen;
- 2 forcing functies voor zeer variabele grootheden die zelden beïnvloed worden door ecologische processen, maar een grote invloed uitoefenen op deze processen (bijvoorbeeld zwevend stof en slib);
- 3 invoerfuncties voor het fysische milieu (bijvoorbeeld instraling door licht, temperatuur, veranderingen in morfologie);
- 4 invoerfuncties voor het transport van water en nutriënten tussen de compartimenten en over de begrenzingen van het watersysteem;
- 5 procesparameters en coëfficiënten; en
- 6 fysische en chemische constanten.

DELWAQ 4 is zeer flexibel met betrekking tot de definitie van een invoergrootheid. Naar behoefte kan, door een invoerparameter onder de juiste groep te hangen, deze worden gehanteerd als:

- constante in ruimte en tijd;
- temporeel constante functie van de ruimte;
- ruimtelijk constante (forcing) functie van de tijd;
- (forcing) functie van ruimte en tijd.

Een tijdsfunctie kan naar keuze:

- willekeurig van vorm zijn, via nulde- of eerste-orde interpolatie tussen voor tijdstippen in de invoer opgegeven discrete waarden;
- een oscillerende vorm hebben (harmonische functie en Fourier-functies), via opgave in de invoer van gemiddelde waarde, amplitude en frekwentie; en
- een specifieke vorm hebben, via een in de programmatuur opgenomen functie.

De gebruiker kan een toestandsgrootte naar keuze modelleren dan wel als invoerparameter opleggen als forcing functie.

DELWAQ 4 staat daarmee een vrijwel onbeperkt aantal combinaties van invoer- en modelleringspecificaties toe. Behalve de voorkeurscombinatie kunnen dus ook door specifieke gebruikers gekozen combinaties worden toegepast. Elke gebruiker kan via de invoer een configuratie kiezen die past bij het te modelleren systeem en bij zijn specifieke vraagstelling.

Voorziene uitbreidingen

Uitbreidingen betreffen uiteraard de invoer voor in de toekomst aan het GEM toe te voegen functionele groepen, toestandsvariabelen en procesformuleringen.

4.7 Uitvoer

De uitvoer van het pilot-GEM wordt volledig bepaald door de opgenomen toestandsvariabelen. Naast gehalten uitgedrukt in elementen (C,N,P,Si) zullen ook biomassa's (drooggewicht en natgewicht) en soortensamenstelling worden gegenereerd. DELWAQ 4 levert standaard per segment de gesimuleerde en de opgelegde toestandsvariabelen (gehalten) en optredende fluxen (massastromen van processen en transport) als functie van de tijd. De dichtheid van de gegevens in ruimte en tijd is door de gebruiker in te stellen, maar vertoont uiteraard een relatie met de gekozen ruimtelijke schematisatie en de tijdstap.

Met voor DELWAQ beschikbare naverwerkingsprogramma's kunnen de toestandsvariabelen grafisch worden weergegeven als tijdsfuncties of ruimtelijke beelden. Stofbalansen kunnen worden gepresenteerd in de vorm van blokdiagrammen. Aanvullend benodigde grootheden zijn:

- over specifieke ruimte en/of tijd gemiddelde waarden;
- over specifieke ruimte en/of tijd geaggregeerde waarden; en
- maximale en minimale waarden in een specifieke periode en ruimte.

De naverwerkingsprogrammatuur zal zodanig moeten worden aangepast, dat bovenstaande informatie kan worden geleverd.

Voorziene uitbreidingen

Uitbreidingen betreffen uiteraard de in de toekomst aan het GEM toe te voegen toestandsvariabelen. Voorts is de huidige programmatuur voor het maken van balansdiagrammen voor verbetering vatbaar voor wat betreft het gebruiksgemak en de presentatiewijze. Met betrekking tot additionele uitvoer valt bijvoorbeeld te denken aan:

- de mate van retentie van nutriënten; en
- het aandeel van de diverse bronnen van geloosde stoffen in de gerealiseerde concentraties en massastromen.

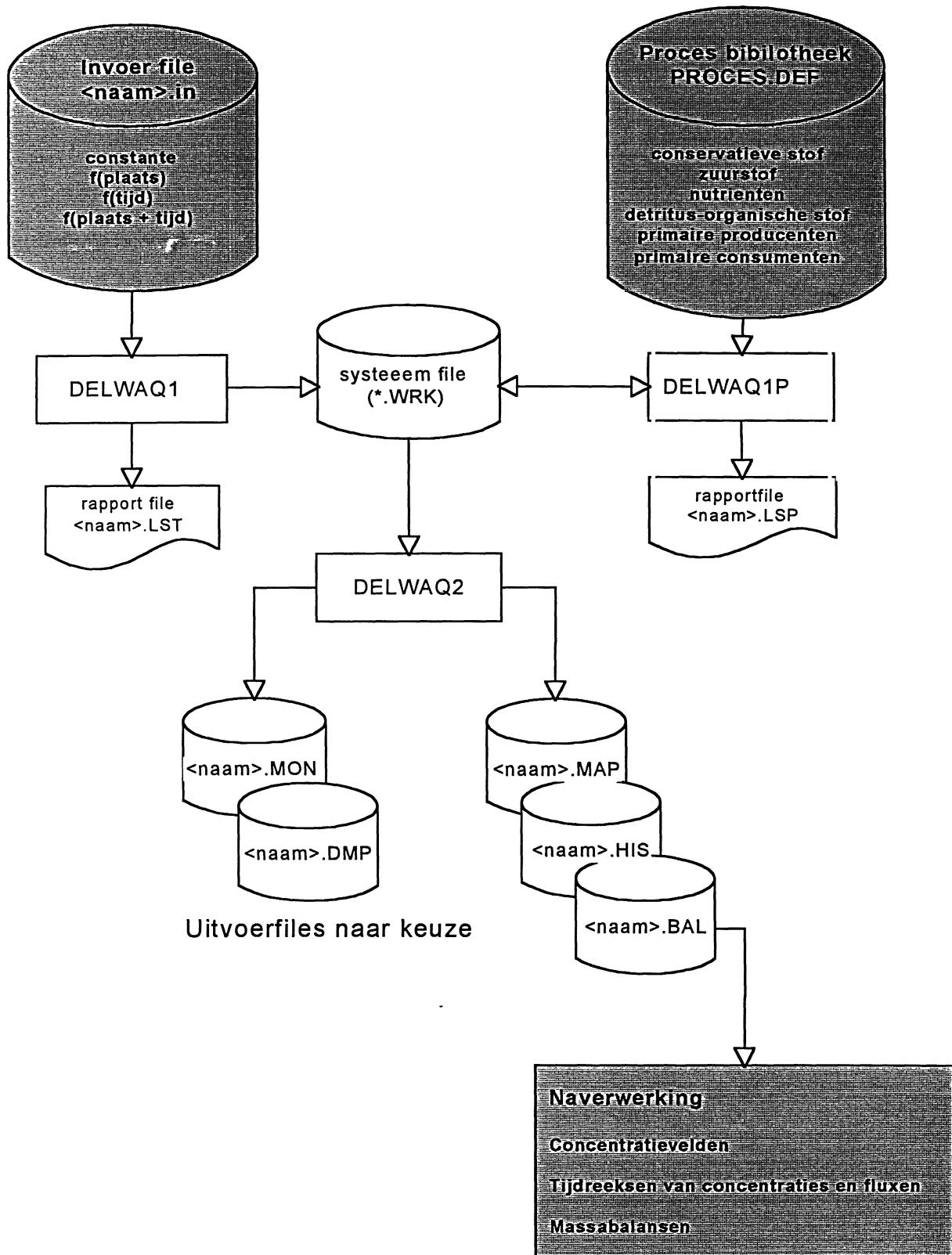
4.8 Basisstructuur

Het GEM dient een platform voor de inbreng van nieuwe modelontwikkelingen in de beleidsmodellering te zijn. Tevens moet het kunnen functioneren als instrument voor de beleids- en beheeranalyse. Het modelleren van aquatische functionele groepen is niet op alle fronten (bijv. consumenten) zodanig ontwikkeld, dat dynamische modellering altijd het beste resultaat levert of dat significante verbeteringen en uitbreidingen niet te verwachten zouden zijn. In detail ontbreekt er nog veel proceskennis. Het GEM dient daarom een open structuur te hebben, zodat nieuwe inzichten gemakkelijk kunnen worden ingebouwd. De object-georiënteerde benadering van de modellering in DELWAQ voldoet volledig aan deze eis. Figuur 4.12 toont de basisstructuur van DELWAQ met de mogelijkheden voor invoer en uitvoer, zoals voorzien voor het GEM.

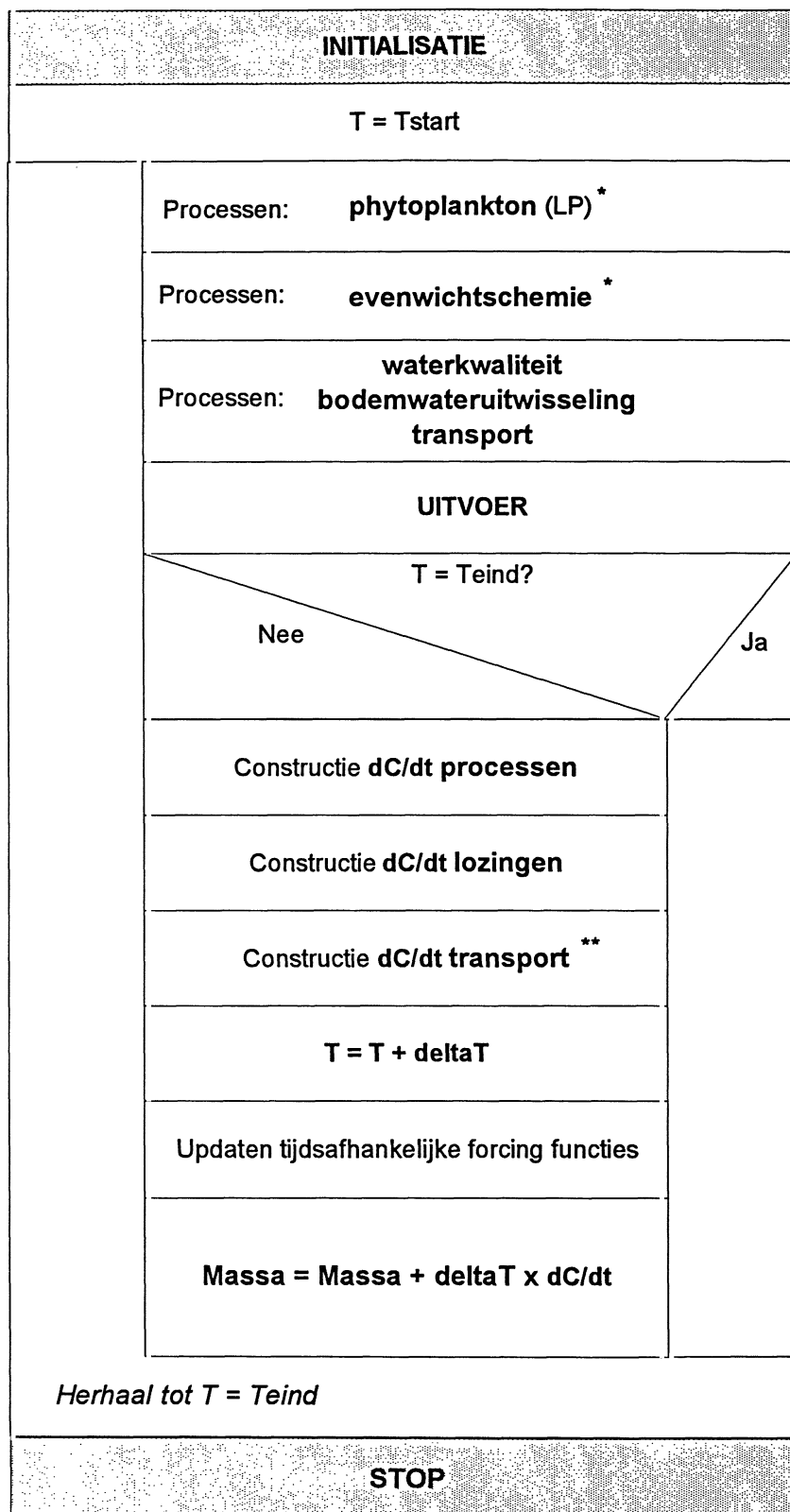
DELWAQ kent 'kern'-modules, waarin het stoftransport tussen compartimenten en de concentraties van gesimuleerde toestandsvariabelen worden berekend. Tevens houdt dit deel van de programmatuur alle massabalansen bij. De massastromen van afzonderlijke waterkwaliteitsprocessen en ecologische processen worden berekend door de 'gebruikersroutine', welke naar believen kan worden gevuld met procesroutines vanuit een zogenaamde procesbibliotheek. Bovendien is elk proces indien zinvol vertaald naar deelprocessen (subroutines). Via wijziging van de procesmatrix kunnen naar behoefte toestandsvariabelen en processen worden toegevoegd of verwijderd. De uitbreiding naar microverontreinigingen wordt op geen enkele wijze belemmerd. Integendeel, in de procesbibliotheek zijn tot en met het niveau van primaire productie door fytoplankton reeds vrijwel alle relevante processen opgenomen. Voor de basisstructuur en de mogelijkheden van DELWAQ wordt verwezen naar de beschikbare handleidingen (WL, 1994 en 1995).

Procesformuleringen zijn dus in DELWAQ eenvoudig te vervangen door alternatieve formuleringen. Zoals reeds uit paragraaf 4.6 blijkt kunnen toestandsvariabelen door het kiezen van de juiste invoer worden gesimuleerd dan wel worden opgelegd als forcing functies.

De berekening van de proces- en transportfluxen en de daaruit resulterende concentratievelden verloopt in DELWAQ in een specifieke volgorde (zie figuur 4.13). Flexibel zal er in het GEM kunnen worden gekozen voor het gebruik van diverse methoden voor ruimtelijke en temporele (dis)aggregatie (zie par. 4.5).



Figuur 4.12 De basisstructuur van DELWAQ met de invoer en uitvoer zoals voorgesteld voor het pilot-GEM.



Figuur 4.13 De berekeningsprocedure voor transport en processen in het GEM volgens DELWAQ.

*) Naar keuze toepassing van fractionele stapmethode.

***) Keuze uit diverse berekeningsmethoden voor (dis)aggregatie.

In het GEM wordt ook onderscheid gemaakt tussen interne ruimtelijke en temporele aggregatie ten behoeve van de berekening en de externe aggregatie ten behoeve van de presentatie van resultaten. De mate van aggregatie kan in beide gevallen door de gebruiker worden ingesteld. De bodemcompartimenten met een aantal lagen (voor de simpele bodemoptie vrij te kiezen aantal) kunnen naar behoefte worden toegewezen aan (groepen van) watercompartimenten. Dit komt tot stand via het invullen van een uitwisselingsmatrix.

Bij de bouw van het GEM kan uitgegaan worden van de naamgeving van parameters, zoals deze in DELWAQ wordt gehanteerd. Afstemming met de overige bij de ontwikkeling van GEM betrokken instituten is echter gewenst. De systematiek van de naamgeving van ERSEM kan hierbij model staan.

Voorziene uitbreidingen

Systematische uitbreidingen van de DELWAQ-structuur worden vooralsnog niet voorzien.

4.9 Specificaties hardware en software

Hardware

In principe worden er geen eisen aan de hardware gesteld. Het GEM zal zo veel mogelijk platform-onafhankelijk moeten zijn. Dit impliceert dat de in DELWAQ toegepaste programmeertaal (FORTRAN), eventueel na kleine aanpassingen, geschikt moet zijn voor de toepassing op IBM-compatibele PC's en op workstations. De programmatuur moet zonder geheugenproblemen en met acceptabele rekestijden (< een uur voor een jaarsimulatie van de meest complexe applicatie) kunnen worden gedraaid op een PC met Pentium-processor (kloksnelheid 60 herz).

Software

Specificaties aangaande de software betreffen:

- 1 het operating system;
- 2 de programmeertaal;
- 3 de gebruiksschil;
- 4 het case beheer;
- 5 de naverwerking; en
- 6 toeleverende databases.

Met betrekking tot het pilot-GEM worden nog geen specificaties gevraagd voor de gebruiksschil, het case-beheer en toeleverende databases.

Ad 1) Voor het te kiezen operating system bestaan de volgende opties:

- DOS en WINDOWS/DOS voor de PC; en
- XWINDOWS/UNIX voor het workstation.

Vooralsnog wordt gesteld dat de in GEM toe te passen programmeertaal het gebruik onder WINDOWS/DOS en onder XWINDOWS/UNIX mogelijk moet maken.

Ad 2) De programmeertaal is bij keuze van DELWAQ vastgelegd. Deze is FORTRAN 77.

Ad 5) De naverwerking van modeluitvoer dient op verschillende plaatsen en met verschillende pakketten te kunnen worden uitgevoerd. Dit maakt het noodzakelijk de uitvoer te creëren in een uniform data format. Overleg met betrokken instituten is vereist. Voor de naverwerking wordt verder verwezen naar paragraaf 4.7.

Voorziene uitbreidingen

Ad 3 en 4) In de praktijk van de beleids- en beheeranalyse blijkt de noodzaak van goede administratie en documentatie van uitgevoerde analyses. Deze functionaliteit wordt geboden door WL's Case Management Tool (CMT) als overkoepelend onderdeel van een gebruiksschil. Het bouwen van een schil onder WINDOWS op basis van CMT wordt als een waarschijnlijke optie gezien. De menu-gedreven invoer- en uitvoerprocedures kunnen worden gebouwd op basis van bijvoorbeeld REXX (bestaand) of een hiervan af te leiden analogon voor WINDOWS.

Ad 6) Ecologische stroommodellen zijn doorgaans afhankelijk van een aanzienlijke hoeveelheid invoergegevens (aansturing, randvoorwaarden, calibratiegegevens). In de praktijk worden de bij de modellen behorende databestanden ten behoeve van analyses regelmatig aangesproken, zonder dat er met het model gerekend wordt. Daarom is het van belang dat de databases, die ten behoeve van het GEM per watersysteem aangemaakt worden, goed georganiseerd worden. Nadere specificaties dienen te worden opgesteld.

5 Discussie, conclusies en aanbevelingen

Het beeld dat in het voorgaande hoofdstuk wordt opgeroepen is dat DELWAQ 4 in zijn huidige vorm reeds een fors deel van de benodigde functionaliteit, formuleringen en gebruikersfaciliteiten levert. De voorgestelde aanpassingen van bestaande procesroutines betreffen:

- fosfaatsorptie;
- bezinking en resuspensie van geadsorbeerd fosfaat, silicaat en detritus; en
- de productiesnelheid en sterftesnelheid in BLOOM.

De voor het pilot-GEM benodigde uitbreidingen, dat wil zeggen nieuwe procesroutines, omvatten:

- de bodemmodule op basis van ERSEM (en mogelijk de module van NIOO-CEMO);
- de simpele bodemmodule (anorganische en organische componenten);
- de Monod-type module voor fytoplankton;
- de module voor microfytobenthos; en
- de mineralisatie en vorming van nieuwe detritusfracties in de waterkolom.

Aan verdere, toekomstige uitbreidingen lijken geen inhoudelijke beperkingen gesteld te zijn. De uitbreidbaarheid met toestandvariabelen en procesroutines wordt slechts begrensd door pragmatische aspecten, zoals de omvang van de rekenlast en de omvang van het RAM-geheugen van PC's. Procesroutines kunnen in een handomdraai worden vervangen of als extra optie worden toegevoegd, indien de benodigde invoer- en uitvoerparameters beschikbaar zijn. Indien dat niet het geval is, is aanpassing van de parameter- en procesadministratie nodig. Dit zal meestal een geringe inspanning met zich mee brengen.

Gewenste aanpassingen en uitbreidingen van de berekeningswijze van het stoftransport betreffen ruimtelijke en temporele (dis)aggregatie. Hiervoor zijn 5 mogelijkheden voorgesteld. De mate waarin deze in het pilot-GEM kunnen worden gerealiseerd is afhankelijk van de beschikbare middelen. Voorsnog lijkt de realisatie van mogelijkheden 1, 2 en 3 zeker haalbaar. Deze vereisen verbetering van:

- bestaande programmatuur voor de koppeling van waterbeweging aan stoftransport (o.a. DIDO);
- de aansturing van de verschillende gridniveaus in DELWAQ; en
- de mogelijkheden voor (dis)aggregatie voor de presentatie van resultaten.

Voorts moeten voor de implementatie van mogelijkheid 3 in DELWAQ modules gemaakt worden voor aggregatie, disaggregatie, aansturing van de berekeningscyclus, en uitvoer.

Het pilot-GEM zal worden geoperationaliseerd voor 2-D horizontale simulaties. Dat impliceert dat het model nog niet goed bruikbaar is voor gestratificeerde systemen zoals het Grevelingenmeer. Deze beperking kan in de toekomst worden opgeheven, omdat in principe alle procesroutines in een 3-D versie kunnen worden omgezet. (Voor BLOOM wordt hieraan gewerkt!) Afgezien van deze beperking lijken er principieel geen grenzen gesteld te zijn ten aanzien van de keuze van de te simuleren estuariene watersystemen. De beperking is niet van belang voor de implementatie van het GEM voor de Westerschelde en de Waddenzee.

Ten aanzien van de afhandeling van stoftransport (advectie en dispersie) en de numerieke berekeningsmethoden is DELWAQ 4 'state-of-the-art'. De mate van ruimtelijk en temporeel detail wordt begrensd door dezelfde aspecten als de mate van procesdetail. Aan getij-gemiddeld rekenen zijn geen andere beperkingen gesteld. Getij-oplossend rekenen heeft voordelen voor de nauwkeurigheid van de berekening van het stoftransport en de bodem-water uitwisseling. Om pragmatische redenen zal dit waarschijnlijk nog niet in het pilot-GEM kunnen worden gerealiseerd.

In principe kunnen alle mogelijke modelvarianten in het GEM worden gerealiseerd door via de invoer keuzen te maken met betrekking tot het detail en de vorm van de ruimtelijke schematisatie, te simuleren toestandsvariabelen, als forcing functie op te leggen toestandsvariabelen, alternatieve procesmodules en -routines, en de aard en vorm van de invoerparameters. De flexibiliteit lijkt daarmee maximaal te zijn. Uiteraard zijn ten aanzien van het pilot-GEM nog beperkingen gesteld ten aanzien van de mee te modelleren toestandsgrootheden. Deze betreffen:

- de primaire consumenten mesozoöplankton, microzoöplankton en suspensieëters (mossel en kokkel), die opgenomen worden in de vorm van forcing functies; en
- de primaire consumenten sedimenteters en hyperbenthos, die niet zijn opgenomen;
- de primaire producenten macrofyten (*Ulva*, *Zostera marina*, etc.), die niet zijn opgenomen.

Het ontbreken van deze functionele groepen als dynamisch gemodelleerde grootheden impliceert ook een beperking van de functionaliteit. De beperking geldt in het bijzonder voor onderzoek aan een groot deel van de vraagstukken gerelateerd aan systeemmanipulatie en systeemgebruik. Voor zover vraagstukken aangaande eutrofiëring en zuurstofhuishouding niet specifiek betrekking hebben op ontbrekende functionele groepen kunnen al dergelijke vraagstukken met het model worden geanalyseerd. Hetzelfde geldt ten aanzien van de analyse van effecten van autonome ontwikkelingen in klimaat en meteorologische condities.

Tenslotte wordt aanbevolen om het pilot-GEM (en in ieder geval het volledige GEM) te voorzien van:

- een gebruikersschil, gebaseerd op een instrument voor het beheer van cases; en
- een uitgebreid pakket voor de presentatie van de berekeningsresultaten in de vorm van concentratievelden, tijdreeksen van concentraties en fluxen, en stofbalansen (actuele, geaggregeerde, minimale en maximale waarden voor door een gebruiker gekozen tijdsintervallen en deelgebieden).

Het bij WL beschikbare CMT (Case Management Tool) biedt goede mogelijkheden voor casebeheer.

6 Literatuur

RIKZ, Rijkswaterstaat, november 1993.

Generieke Ecologische Stofstroommodellering voor Estuaria; Programma van Eisen.
Werkdocument GWAO-93.151x (M.W.M. van der Tol en I. de Vries).

RIKZ, Rijkswaterstaat, 1995.

Drie-dimensionale modellering van het transport van zwevend stof in de Nederlandse kustwateren.
Rapport RIKZ-95.019 (J.M. de Kok, R.M. Salden en I.D.M. Rozendaal).

Waterloopkundig Laboratorium / WL, IBN-DLO, NIOO-CEMO, NIOZ, RIKZ, maart 1995.

Generiek Estuarium Model (GEM); Aanzet voor het functioneel ontwerp.
Rapport onderzoek T1058 (J.G.C. Smits et al.).

Waterloopkundig Laboratorium / WL, February 1995.

DELWAQ 4.0. User's Manual.

Waterloopkundig Laboratorium / WL, September 1995.

DELWAQ 4.0. Technical Reference Manual (draft).

Appendix 1: Koppeling van SLIB3D met het MANS/KSENOS-model

Koppeling met MANS/KSENOS.

Het MANS/KSENOS instrumentarium maakt gebruik van met TRIWAQ berekende hydrodynamische grootheden voor de kuststrookschematisatie en van met SLIB3D berekende transportrichtingen voor zwevend stof en slib. Met het oog op het minimaliseren van rekentijden rekent MANS/KSENOS op getijgemiddelde en vertikaal gemiddelde basis. Wel is het zo dat er een apart bodemcompartiment wordt onderscheiden, waar slib tijdelijk of blijvend kan sedimenteren. Verder wordt er horizontaal met een 10 x zo grof rooster gerekend, d.w.z. met gemiddeld iets meer dan 3 x de roosterafstand van het kuststrookmodel (fig.A1).

De benodigde data m.b.t. hydrodynamica en slibtransport worden volledig getijoplossend en 3D op het gedetailleerde rooster berekend. Het laatste voorlopig voor een standaard jaargemiddelde situatie.

De koppeling van SLIB3D naar MANS\KSENOS is zodanig, dat zo veel mogelijk van de karakteristieken van de verspreiding, resulterend na één getij bewaard blijven.

MANS/KSENOS maakt gebruik van het waterkwaliteitsprogramma DELWAQ, dat de benodigde data vanaf files inleest. De verspreiding van aan slib geadsorbeerde stoffen wordt in DELWAQ berekend aan de hand van de transportpaden, die met SLIB3D zijn berekend. Deze transportpaden worden in principe gegeven door de afstand en richting van de verplaatsing, die een slibdeeltje, vertrekkend vanuit een gegeven punt na een getij heeft ondergaan. Er wordt hier echter niet gerekend met deeltjes, maar met massa's, die initiëel volgens een standaardverdeling over een bepaald volume zijn verdeeld. Deze volumina worden gevormd door de vakken van de twee-dimensionale grove DELWAQ-schematisatie. Voor iedere initiële massaverdeling wordt er een getij doorgerekend (van kentering tot kentering) en het resulterende verspreidingspatroon wordt in gecondenseerde vorm opgeslagen. Dit houdt in dat er een horizontaal verspreidingspatroon wordt opgeslagen van wat er op de bodem is terecht gekomen, en één van de massa in de waterkolom.

Zo'n verspreidingspatroon wordt in principe gegeven door een eindige verzameling vaknummers (van de gedetailleerde schematisatie) met de in ieder vak aanwezige massa. Per (horizontaal) vak is de massa in het watercompartiment de som van de massa's in alle waterlagen.

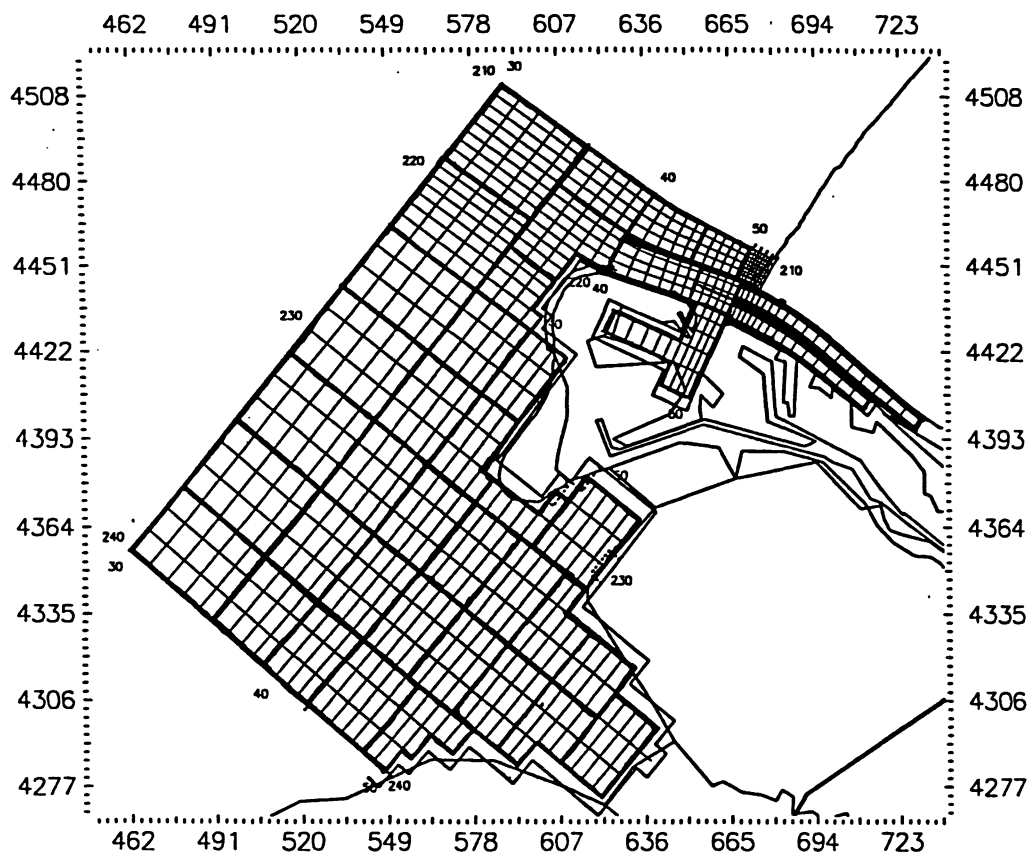
Daarnaast wordt er per DELWAQ-vak ook een getij doorgerekend met een massa, die initiëel homogeen over de bodem van dat vak is verdeeld. Dit levert eveneens twee horizontale verspreidingspatronen op. De interface SLIB3D-DELWAQ is dus een file met voor ieder DELWAQ-vak (dat zijn er ongeveer 2500) 4 horizontale verspreidingspatronen, ieder gegeven als een eindige (# ongeveer 50) verzameling vakindexen met massa's (zie fig. A2).

Een tijdstap van de getijgemiddelde berekening gaat als volgt: uitgaande van een initiële verdeling of van een bron wordt voor ieder DELWAQ-vak, waar massa aanwezig is, de verspreidingspatronen voor beide compartimenten uit de interface-file gelezen en de aanwezige massa wordt volgens dit patroon verdeeld. In iedere ontvangende cel wordt de massa opgeteld bij de massa's die uit andere DELWAQ-vakken afkomstig zijn (superpositie). Als dit voor alle DELWAQ-vakken gedaan is, is er voor bodem en voor water ieder een twee-dimensionale massaverdeling op het fijne rooster aanwezig.

Hoewel de getijgemiddelde berekening in principe op een grover rooster plaatsvindt, zijn de berekende lange termijn verspreidingspatronen (fig. A3, A4) niet beïnvloed door numerieke diffusie of andere numerieke fouten, die over het algemeen het gevolg zijn van een grote maaswijdte van het rooster.

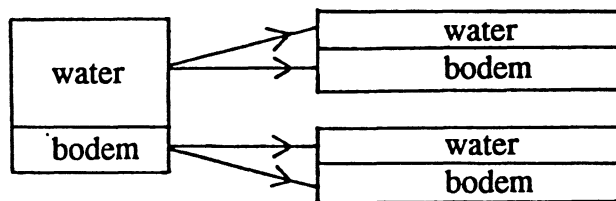
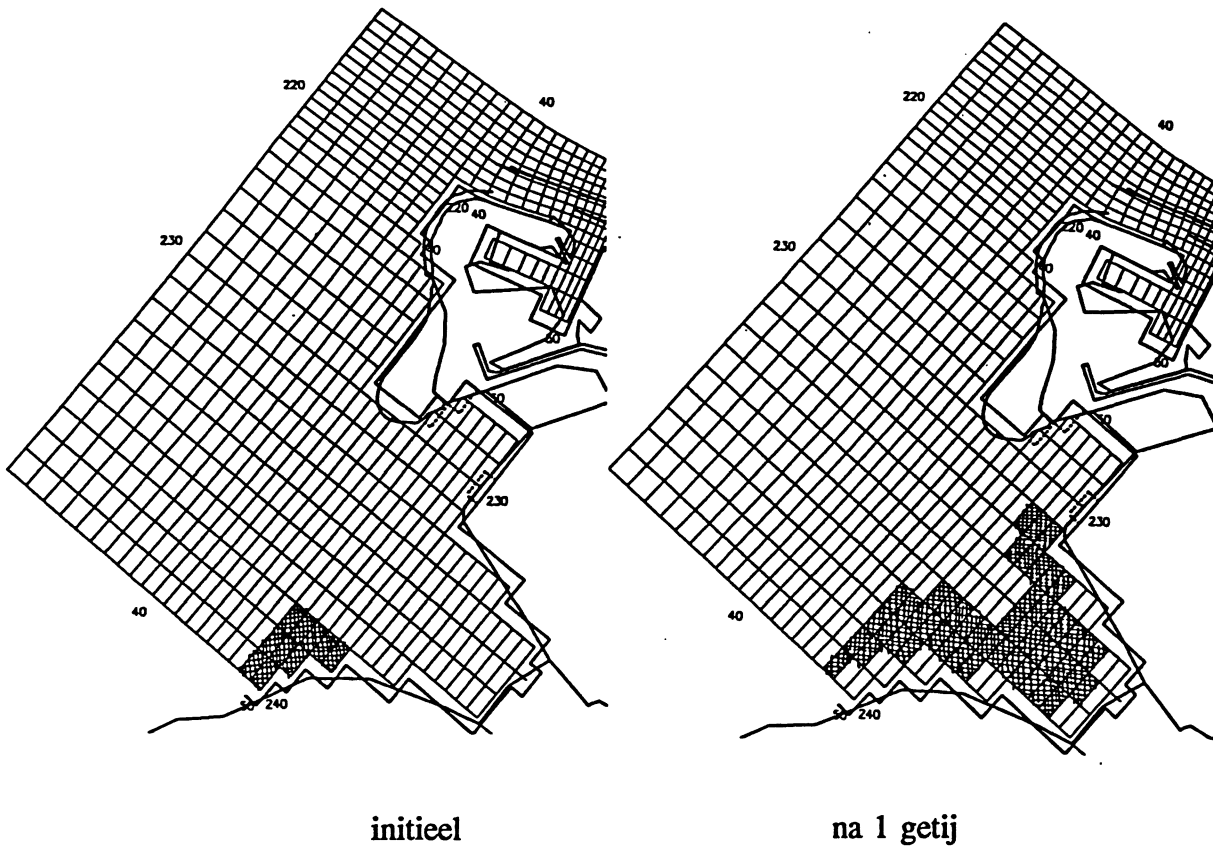
Waar nodig kan per tijdstap en per vak extra depositie of resuspensie worden toegevoegd, door massa van het water naar het bodemcompartiment of andersom te verplaatsen. Bronnen en putten worden gemodelleerd als het toevoegen of onttrekken van massa. Concentratie-randvoorwaarden worden opgelegd door het vervangen van de massa in randvakken door een massa in de waterkolom, die gelijk is aan concentratie maal vakvolume. Het is achteraf niet meer mogelijk om mengingsparameters, valsnelheden of kritische erosie- of sedimentatie- schuifspanningen te wijzigen.

Per windsituatie moet een getijoplossende run worden gedaan om een aparte interface-file met verspreidingspatronen te genereren.



Figuur A1.

Het DELWAQ-rooster ingetekend in (een gedeelte van) het fijne rooster.



Figuur A2.

Voorbeeld van een initiële verdeling over een DELWAQ-vak en één van de vier verspreidingspatronen na 1 getijperiode.



location Delft
Rotterdamseweg 185
p.o. box 177
2600 MH Delft
The Netherlands
telephone +31 15 569353
telefax + 31 15 619674
telex 38176 hydel-nl
e-mail info@wldelft.nl

As from October 10, 1995
telephone +31 15 2569353
telefax +31 15 2619674

location 'De Voorst'
Voorsterweg 28, Marknesse
p.o. box 152
8300 AD Emmeloord
The Netherlands
telephone +31 5274 2922
telefax +31 5274 3573
telex 42290 hylvo-nl
e-mail info@wldelft.nl

As from October 10, 1995
telephone +31 527 242922
telefax +31 527 243573

