

waterloopkundig laboratorium
delft hydraulics laboratory

2e exemplaar

ontwikkeling van een statistisch model
en toepassing ervan op enkele water-
kwaliteitsparameters uit het Hollands
Diep en Haringvliet

tekst

verslag onderzoek

R1176 -II

april 1979

ontwikkeling van een statistisch model
en toepassing ervan op enkele water-
kwaliteitsparameters uit het Hollands
Diep en Haringvliet

tekst

verslag onderzoek

R1176

april 1979

INHOUD

Lijst van tabellen en figuren

Symbolen en eenheden

	blz.
<u>1</u> <u>Inleiding</u>	
1.1 Probleemstelling en achtergronden	1
1.2 Doelstellingen.	2
1.3 Opbouw rapport.	2
<u>2</u> <u>De waterhuishoudkundige situatie in het onderzoekgebied</u>	
2.1 Algemeen.	4
2.2 Kwantitatieve aspecten.	5
2.3 Kwalitatieve aspecten in relatie tot de afvoer. . . .	10
<u>3</u> <u>Het concentratieverloop uitgaande van de basisvergelij-</u> <u>kingen</u>	
3.1 Inleiding	14
3.2 De basisvergelijkingen.	14
3.3 Het concentratieverloop in een quasi-stationaire situatie.	17
3.4 Het concentratieverloop bij een 1 ^e orde proces	
3.4.1 Algemeen.	20
3.4.2 Het concentratieverloop bij konstante stroomsnelheid u	20
3.4.3 Het concentratieverloop bij een plaatsafhankelijke stroomsnelheid.	21
3.4.4 Het concentratieverloop bij tijdsafhankelijke stroomsnelheid.	22
3.4.5 Het concentratieverloop bij tijds- en plaatsafhankelijke stroomsnelheid.	22
3.5 Het concentratieverloop in niet-quasi-stationaire situaties	23
<u>4</u> <u>Modelbenadering</u>	
4.1 Het algemene model	
4.1.1 Inleiding	24
4.1.2 Schattingsprocedures van het algemene model	25

4.1.3	Problemen bij de toepassing	31
4.1.4	Presentatie resultaten algemene model	33
4.2	Het uitgebreide model	
4.2.1	Inleiding	34
4.2.2	Schattingsprocedure van het uitgebreide model	35
4.2.3	Problemen bij de toepassing	40
4.2.4	Presentatie resultaten van het uitgebreide model. . .	42
4.3	De keuze van het model.	42
4.4	Nadere (statistische) analyse van de plaatsfunctie β	45
5	<u>Toepassing van het model op enkele waterkwaliteits-parameters</u>	
5.1	Algemeen.	50
5.2	De resultaten van het algemene model voor de diverse stoffen	
5.2.1	Chloride	
5.2.1.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}$	50
5.2.1.2	De tijdfunctie $\hat{\gamma}$	52
5.2.2	Totaalfosfaat	
5.2.2.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}$	53
5.2.2.2	De tijdfunctie $\hat{\gamma}$	54
5.2.3	Orthofosfaat	
5.2.3.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}$	54
5.2.3.2	De tijdfunctie $\hat{\gamma}$	55
5.2.4	Het zwevende stofgehalte	
5.2.4.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}$	55
5.2.4.2	De tijdfunctie $\hat{\gamma}$	56
5.2.5	Nadere (statistische) analyse van de plaatsfunctie	56
5.3	De resultaten van het uitgebreide model voor de diverse stoffen	
5.3.1	Chloride	
5.3.1.1	Algemeen.	59
5.3.1.2	De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$	60
5.3.1.3	De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$	61
5.3.2	Totaalfosfaat	
5.3.2.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$	62
5.3.2.2	De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$	62

5.3.3	Orthofosfaat	
5.3.3.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$	62
5.3.3.2	De tijdfunkties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$	62
5.3.4	Zwevende stof	
5.3.4.1	De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$	63
5.3.4.2	De tijdfunkties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$	63
5.3.5	Nadere (statistische) analyse van de plaatsfunctie β	63
5.4	Interpretatie van de resultaten	66
6	<u>Konklusies en aanbevelingen</u>	69

LITERATUUR

FIGUREN EN TABELLEN

BIJLAGEN

Lijst van figuren en tabellen

FIGUREN:

- 1.1 : De bemonsteringsstations in het Hollands Diep en Haringvliet.
- 2.1 : De gemiddelde concentraties in het Hollands Diep-Haringvliet.
- 2.2 : Afvoer op diverse plaatsen in het onderzoekgebied als functie van de afvoer bij Lobith.
- 2.3 : De afvoer bij Lobith in de periode augustus 1971 - december 1973.
- 2.4 : Geschematiseerd verloop van de relatieve stroomsnelheid.
- 2.5/ : De gemiddelde concentraties in het Hollands Diep-Haringvliet na
- 2.16 splitsing in 4 afvoerklassen.
- 2.17 : Het aantal bemonsteringstijdstippen per afvoerklasse.
- 2.18; : Het chloridegehalte van station H10 respektievelijk H12 als functie
- 2.19 van het chloridegehalte van station H11 (Deltadienst).
- 2.20; : Het chloridegehalte van station HV19 respektievelijk SP20 als
- 2.21 functie van het chloridegehalte van station H10 (Deltadienst).
- 4.1 : De gemeten en de met het algemene model gerekonstrueerde totaalfosfaatconcentratie in het Hollands Diep als functie van de tijd.
- 4.2 : De gemeten en de met het uitgebreide model gerekonstrueerde totaalfosfaatconcentratie in het Hollands Diep als functie van de tijd.
- 5.1/ : De plaatsfunctie $\hat{\beta}$ in het Hollands Diep-Haringvliet van chloride,
- 5.16 totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof voor de periode '72^x, '73 en '72^x + '73 (algemene model).
- 5.17/ : De tijdfunctie $\hat{\gamma}$ van 4 stoffen voor de periode '72^x + '73 (algemene
- 5.20 model)
- 5.21/ : De plaatsfunctie $\hat{\beta}$ in het Hollands Diep-Haringvliet van 4 stoffen
- 5.36 voor de periode '72^x, '73 en '72^x + '73 (uitgebreide model).
- 5.37/ : De tijdfunctie $\hat{\alpha}$ voor 4 stoffen voor de periode '72^x + '73 (uitge-
- 5.40 breide model).
- 5.41/ : De tijdfunctie $\hat{\gamma}$ voor 4 stoffen voor de periode '72^x + '73 (uitge-
- 5.44 breide model).
- 5.45 : De reciproke waarde van $\hat{\gamma}$ (algemene model) als functie van de tijd (chloride).
- 5.46 : De korrelatiecoëfficiënt van $\hat{\gamma}^{-1}$ en de afvoer bij Lobith als functie van de looptijd (algemene model).
- 5.47/ : De plaatsfunctie $\hat{\beta}$ van het algemene model als functie van $\hat{\beta}$ van het
- 5.50 uitgebreide model voor 4 stoffen (periode '72^x + '73).

FIGUREN (vervolg):

- 5.51/ : De tijdfunctie $\hat{\gamma}$ van het algemene model als functie van de tijd-
5.54 functie $\hat{\alpha}$ van het uitgebreide model voor 4 stoffen (periode '72^x + '73).
5.55 : De tijdfunctie $\hat{\alpha}$ van totaalfosfaat als functie van $\hat{\alpha}$ van orthofos-
faat (uitgebreide model, periode '72^x + '73).
5.56 : De plaatsfunctie $\hat{\beta}$ van totaalfosfaat als functie van de plaatsfunk-
tie $\hat{\beta}$ van orthofosfaat (algemene model, periode '72^x + '73).

TABELLEN:

- 4.1 : Het algemene en uitgebreide model toegepast op drie testsituaties.
5.1 : Het aantal waarnemingen per stof, periode en bemonsteringsstation.
5.2 : De plaatsfunctie $\hat{\beta}$, bepaald met het algemene model.
5.3 : De tijdfunctie $\hat{\gamma}$, bepaald met het algemene model.
5.4 : De plaatsfunctie $\hat{\alpha}$, bepaald met het uitgebreide model.
5.5 : De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}$, bepaald met het uitgebreide model.
5.6 : Waarden van $\hat{\lambda}_0$ en de daaruit berekende concentratie (algemene model).
5.7 : Toets van Spearman: linker en rechter kritieke waarden van de toet-
singsgrootte d^2 bij variabele onbetrouwbaarheidsdrempel α .
5.8 : Toets van Spearman toegepast op de met het algemene model berekende
plaatsfunctie van 4 stoffen.
5.9 : Toets van Spearman: bepaling van de rangkorrelatie tussen x_i en
 $y_i = \hat{\beta}_i - p_0 x_i$, waarin $p_0 = \frac{1}{2} p_1$ (algemene model).
5.10 : Toets van Spearman: bepaling van de rangkorrelatie tussen x_i en $\hat{\beta}_i$
(uitgebreide model).
5.11 : Toets van Spearman: bepaling van de rangkorrelatie tussen x_i en
 $y_i = \hat{\beta}_i - p_0 x_i$, waarin $p_0 = \frac{1}{2} p_1$ (uitgebreide model).

Lijst van symbolen en eenheden

A	Oppervlakte van de dwarsdoorsnede van een rivier	(m ²)
b	Breedte van de rivier ter plaatse van het wateroppervlak	(m)
c	Koncentratie	(kg/m ³)
<u>C</u>	Stochastische matrix	(-)
<u>d</u>	Toetsingsgrootheid van Spearman	(-)
e _{ij}	Residu	(-)
<u>E</u>	Stochastische matrix	(-)
f	Plaatsfunctie	(-)
g	Tijdfunctie	(-)
h	Waterdiepte	(m)
H ₀	De nulhypothese	(-)
H ₁	De alternatieve hypothese	(-)
i	Positie of rangnummer van een bemonsteringsstation	(-)
k	Reaktiekonstante (1 ^e orde proces)	(s ⁻¹)
K	Afvoerklasse	(-)
L	Lengteschaal	(m)
m	Aantal bemonsteringsstations	(-)
M	Maat voor overeenkomst modelresultaten en metingen	(-)
n	Aantal bemonsteringstijdstippen	(-)
<u>P</u>	Eigenvektor	(-)
P _{ij}	Geeft aan of een bemonstering c _{ij} al dan niet is uitgevoerd	(-)
p ₁ , p ₀	Afname van de plaatsfunctie per lengte-eenheid	(-)
p ₁ , p ₂	Bron- of putterm	(kg/m ³ s)
q	Lozing of onttrekking per lengte-eenheid	(m ² /s)
<u>q</u>	Eigenvektor	(-)
Q	Afvoer	(m ³ /s)
r	Korrelatiecoëfficiënt	(-)
<u>r_s</u>	Toetsingsgrootheid van Spearman	(-)
R	Reaktieterm	(kg/m ³ s)
S	Som van de gekwadrateerde residuen	(-)
<u>s</u> ²	Schatter voor de variantie	(-)
s _i	Rangnummer van een element van de plaatsfunctie β	(-)
s(β _i)	Maat voor de spreiding in de plaatsfunctie β	(-)
s(γ _j)	Maat voor de spreiding in de tijdfunctie γ	(-)

Lijst van symbolen en eenheden (vervolg):

T	Tijdschaal	(s)
T_0	Tijdschaal waarop de afvoer bij Lobith een bepaald percentage of faktor varieert	(s)
T_v	De verblijftijd	(s)
t	Tijd of bemonsteringstijdstip	(s)
$\underline{t}$	Toetsingsgrootte van student	(-)
u	Stroomsnelheid	(m/s)
$\underline{v}$	Plaatsvektor	(-)
$\underline{w}$	Tijdvektor	(-)
x	Plaats/positie	(m)
y_i	Residu	(-)
y_{ij}	Logarithme van de concentratie c_{ij}	(-)
z_{ij}	Grootte die wordt afgeleid van de concentratie	(-)
α	Onbetrouwbaarheidsdrempel	(-)
$\underline{\alpha}$	Koëfficiëntenvektor	(-)
α_j	Tijdfunctie	(-)
β	Plaatsfunctie	(-)
β_i	i^e komponent van β	(-)
$\hat{\beta}$	Geschatte plaatsfunctie	(-)
$\hat{\beta}_i$	i^e komponent van $\hat{\beta}$	(-)
β^I	Plaatsfunctie (algemene model)	(-)
β^{II}	Plaatsfunctie (uitgebreide model)	(-)
γ	Tijdfunctie	(-)
γ_j	j^e komponent van γ	(-)
$\hat{\gamma}$	Geschatte tijdfunctie	(-)
$\hat{\gamma}_j$	j^e komponent van $\hat{\gamma}$	(-)
γ^I	Tijdfunctie (algemene model)	(-)
γ^{II}	Tijdfunctie (uitgebreide model)	(-)
$\delta_{1,2,3,4}$	Konstanten	(-)
$\underline{\varepsilon}_{ij}$	Stochastische variabele	(-)
λ_0	Konstante	(-)
$\underline{\mu}_{max}$	Maximale eigenwaarde	(-)
$\underline{\nu}_{max}$	Maximale eigenwaarde	(-)
$\underline{\xi}$	Orthogonale eigenvektor	(-)
ρ	Toetsingsgrootte van Spearman	(-)
σ	Standaarddeviatie	(-)
σ^2	Variantie	(-)

1 Inleiding

1.1 Probleemstelling en achtergronden

Sedert vele jaren is het Noordelijk Deltagebied onderworpen aan een onderzoekprogramma dat jaarlijks circa 100.000 gegevens oplevert, welke worden ondergebracht in het databestand WAKWAL bij de Dienst Informatie Verwerking in Rijswijk.

Eén van de redenen dat een dergelijk omvangrijk onderzoekprogramma wordt uitgevoerd, is dat de resultaten informatie kunnen geven over de processen in de onderzoeksgebieden.

Aanvankelijk werd getracht (lit. 1) met deze gegevens een massabalans op te stellen voor het in figuur 1.1 aangegeven traject Haringvliet, Hollands Diep, Nieuwe Merwede (vanaf Gorkum) en Amer (vanaf Keizersveer). Dit traject wordt voortaan HD/HV genoemd. Daarvoor werd het onderzoeksgebied opgedeeld in kompartimenten, waarbij twee opeenvolgende bemonsteringspunten in de rivier als grenzen fungeerden.

Getracht werd voor ieder kompartiment een massabalans op te stellen. De resultaten van deze balans verschilden per kompartiment echter zodanig dat behoefte ontstond aan meer informatie omtrent de nauwkeurigheid van het eindresultaat en de betrouwbaarheid van de uitspraken. Deze vraag leidde ertoe dat allereerst de basisvergelijkingen, de noodzakelijke aannamen en de gevolgen daarvan voor de betrouwbaarheid van de eindresultaten werden onderzocht (lit. 2).

Nadat de knelpunten en de noodzakelijke aannamen bekend waren, bleek de onnauwkeurigheid van de bovengenoemde balansmethode zo groot dat werd getracht op een andere wijze informatie over de processen in het onderzoeksgebied te verkrijgen.

Door ing. Eilers van de Deltadienst werden daartoe allereerst diverse bestaande statistische technieken op de gegevens van het chloride toegepast. Met name de resultaten die met (hoofd)komponentenanalyse werden verkregen, hebben geleid tot de opzet van onderhavige statistisch model ter beschrijving van het verloop van diverse waterkwaliteitsparameters in het Hollands Diep en Haringvliet. Vervolgens werden de parameters van het statistische model gekoppeld aan de parameters van een fysisch/deterministisch model, afgeleid uit de basisvergelijkingen voor continuïteit en stoftransport. In een later stadium is het statistische model met behulp van de verkregen achtergrondinformatie uitgebreid en aangevuld.

1.2 Doelstellingen

Het doel van dit onderzoek is het zodanig verwerken van de beschikbare waterkwaliteitsgegevens van het Hollands Diep en Haringvliet, dat een zo goed en betrouwbaar mogelijk kwantitatief beeld wordt verkregen van de omvang van processen welke in het onderzoekgebied optreden, zoals:

- fysische processen: sedimentatie, erosie, verdunning; en
- (bio)chemische reacties: opname van fosfor in organisch materiaal.

De onderzoeksfase waarop het onderhavige rapport betrekking heeft, richt zich vooral op het ontwikkelen van een methodiek ten behoeve van bovenvermelde doelstelling.

1.3 Opbouw rapport

In hoofdstuk 2 wordt allereerst een algemene beschouwing gewijd aan de waterhuishoudkundige situatie in het onderzoekgebied.

Omdat de waterhuishoudkundige toestand in het onderzoekgebied sterk afhankelijk is van de toestand bij Lobith, wordt in de daaropvolgende paragrafen eerst ingegaan op de afvoer als functie van plaats en tijd en vervolgens op de relatie tussen de afvoer bij Lobith en de concentratie van enkele verontreinigingen in het onderzoekgebied.

Omdat de afvoer (en stroomsnelheid) voor het bepalen van massatransporten binnen het onderzoekgebied onvoldoende bekend bleek te zijn, wordt in hoofdstuk 3 het verloop van de concentratie als functie van plaats en tijd theoretisch afgeleid voor stationaire, quasi-stationaire en instationaire stromingstoestanden.

In hoofdstuk 4 worden vervolgens twee statistische modellen geponeerd ter beschrijving van het concentratieverloop. Met behulp van de resultaten van hoofdstuk 2 en 3 worden de fysische achtergronden van de gebruikte parameters in stationaire, respektievelijk quasi-stationaire stromingstoestand beschreven. Omdat het moeilijk is een voorkeur uit te spreken voor één van de twee modellen bij beschouwing van de situatie in het Hollands Diep en Haringvliet, worden beide modellen toegepast op de beschikbare gegevens uit de periode augustus 1971 tot december 1973 voor chloride, zwevende stof, totaalfosfaat en orthofosfaat.

De interpretatie van de modelresultaten met betrekking tot de waterkwaliteitsprocessen volgt in hoofdstuk 5.

Dit onderzoek werd opgedragen door Rijkswaterstaat, Deltadienst, en is uitgevoerd door ir. S. Groot en ir. T. Schilperoort in samenwerking met ir. B.A. Bannink en ing. P.H.C. Eilers van Rijkswaterstaat, Deltadienst, in het kader van het ecologisch modelonderzoek voor het Deltagebied.

2 De waterhuishoudkundige situatie in het onderzoekgebied

2.1 Algemeen

Gegeven de nauwe samenhang tussen waterkwaliteit en waterkwantiteit, dient de waterhuishoudkundige situatie binnen het onderzoekgebied bekend te zijn. De afvoer in de diverse delen van het Noordelijk Deltabekken wordt vrijwel geheel bepaald door de afvoer bij Lobith. In figuur 2.2 is daarom de afvoer in de Nieuwe Merwede, Kil, Hollands Diep, Haringvliet, Spui, Haringvliet-sluizen en Amer weergegeven als functie van de afvoer bij Lobith.

Uit deze figuur blijkt dat er bij een afvoer bij Lobith lager dan $1700 \text{ m}^3/\text{s}$ een lineaire afhankelijkheid bestaat tussen de afvoer bij Lobith en de diverse afvoeren in het onderzoekgebied. De Haringvlietsluizen zijn in een dergelijke situatie gesloten.

Bij een afvoer bij Lobith groter dan $1700 \text{ m}^3/\text{s}$ worden de Haringvlietsluizen geopend en zal de verdeling van de hoeveelheid water aanzienlijk veranderen. Een steeds geringere hoeveelheid water zal via Kil en Spui afgevoerd worden, met als gevolg een toenemende afvoer door de Haringvlietsluizen. Duidelijk is uit de figuur af te lezen dat de waterhuishoudkundige toestand in het Hollands Diep - Haringvliet zeer sterk afhangt van de afvoer bij Lobith: bij lage Lobith-afvoer ($< 1700 \text{ m}^3/\text{s}$) vormt het een semi-stagnant bekken met een verblijftijd van circa 20 dagen en bij hoge Lobith-afvoer ($> 1700 \text{ m}^3/\text{s}$) vormt het een rivier met een verblijftijd, die afneemt tot enkele dagen.

De afvoer waarbij de overgang van een semi-stagnant bekken naar een rivier plaatsvindt, wordt dus hoofdzakelijk bepaald door de afvoer waarbij de Haringvlietsluizen worden geopend (figuur 2.2). Gelet op de variaties van de afvoer bij Lobith in de loop van één jaar (figuur 2.3) is het duidelijk dat het karakter van het Hollands Diep en Haringvliet zich per jaar vele malen wijzigt van een semi-stagnant bekken naar een rivier en omgekeerd.

Bij de beschouwing van de waterkwaliteit in het onderzoekgebied staan vier parameters centraal: chloride (Cl^-), totaalfosfaat (P_{tot}), orthofosfaat (P-PO_4) en zwevende stof.

Een overzicht van het verloop van het gemiddelde gehalte van deze stoffen binnen het onderzoekgebied wordt gegeven in figuur 2.3.

De gemiddelden hebben betrekking op de periode augustus 1971 tot december 1973, kortweg aangeduid als $1972^x + 1973$, en zijn verkregen uit de veertien-daagse bemonsteringen van het water aan het oppervlak.

2.2 Kwantitatieve aspecten

Voor het opstellen van balansen dient zowel informatie over de afvoer als over de concentratie beschikbaar te zijn. De afvoer in het Noordelijk Delta-gebied wordt evenwel niet gemeten, maar berekend met het analoge model DELTAR.

Hierbij vormen de gemeten afvoer bij Lobith en de lozingsprogramma's bij de uitwateringssluizen zoals Volkerak- en Haringvlietsluizen de randvoorwaarden.

Voor de berekening van de DELTAR-afvoer worden bovendien nog enkele zeer belangrijke aannamen met betrekking tot de kwantiteit gedaan.

- Het lozingsprogramma van de Haringvlietsluizen verloopt volgens de richtlijnen van NLP-1970 (lit. 4);
- De gebruikte Maas-afvoer bij Lith is niet de werkelijke (gemeten) afvoer, maar wordt berekend als functie van de afvoer bij Lobith. Er wordt gerekend met de uit statistisch onderzoek gevonden gemiddelde Maas-afvoer (50% overschrijdingswaarde van de dagafvoer) bij de desbetreffende afvoer bij Lobith;
- Het stuwprogramma van de Nederrijn "S 300" wordt aangehouden, hetgeen inhoudt dat bij lage afvoer bij Lobith de afvoer bij de stuw van Driel zodanig geregeld wordt, dat de afvoer via de Gelderse IJssel zo lang mogelijk op $300 \text{ m}^3/\text{s}$ wordt gehouden;
- Aan de Hollandse IJssel, het Volkerak en de Oude Maas worden vaste debieten onttrokken van respectievelijk 30, 25 en $10 \text{ m}^3/\text{s}$. Dit komt globaal overeen met het gemiddelde van de werkelijke onttrekkingen in droge perioden; en
- Uitgegaan is van gemiddelde getij-omstandigheden.

Met behulp van deze aannamen wordt uitgaande van de afvoer bij Lobith de afvoer ter plaatse van het onderzoeksgebied berekend.

Helaas moet met betrekking tot de realiteit van de aannamen enkele opmerkingen gemaakt worden:

- a) Bij de Haringvlietsluizen wordt regelmatig van het lozingsprogramma NLP-1970 afgeweken;
- b) De Maas-afvoer is slechts in beperkte mate gekoppeld aan de afvoer van de Rijn; immers de Maas is een regenrivier en de Rijn vooral gletsjerrivier;

Dit bezwaar is ten dele te ondervangen door bij een groot verschil tussen

berekende en gemeten Maas-afvoer een korrektie toe te passen bij de bepalingen van de debieten van Hollands Diep, Haringvliet, Kil en Spui, maar een eventuele invloed van dit verschil op de verdeelsleutels van de splitsingen Nieuwe Merwede/Beneden Merwede, Oude Maas/Noord en Spui/Kil wordt niet in rekening gebracht;

- c) Er wordt dikwijls afgeweken van het stuwprogramma "S 300";
- d) De afvoercharacteristieken van Volkerak- en Haringvlietssluisen zijn alleen in model onderzocht (afvoercoëfficiënt = 1), terwijl aan de hand van de resultaten van oriënterende metingen aan het prototype naar verwachting een afwijkende waarde zal worden gevonden;
- e) Het "gemiddeld getij" over de periode 1951-1960 blijkt af te wijken van het "gemiddeld getij" over de periode 1961-1970. De invloed van de verschuiving is niet bekend en dus niet in rekening gebracht; en
- f) Rekening dient te worden gehouden met het feit dat een bemonstering een momentopname is uit een periode van 14 dagen, terwijl DELTAR alleen de weekgemiddelde afvoeren kan geven. Vermenigvuldiging van beide ter verkrijging van de vracht geeft dus een onnauwkeurig beeld, dat kan afwijken van de werkelijkheid (lit. 3).

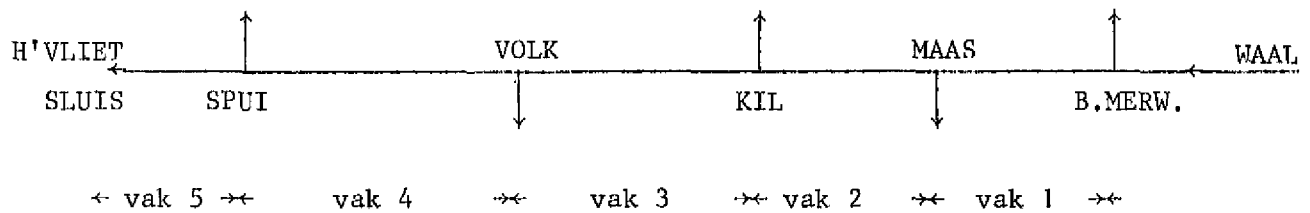
Resumerend kan gesteld worden dat de met behulp van het DELTAR-model berekende weekgemiddelden van de afvoer slechts een globale benadering van de werkelijkheid kunnen zijn.

Eén van de konsekwenties van de noodzakelijk gevolgde benaderingswijze ter bepaling van de afvoer is dat het vrijwel onmogelijk wordt een massabalans op te stellen voor het te beschouwen gebied of kompartiment, waaruit met een aanvaardbare onbetrouwbaarheid kwantitatieve konklusies over de processen in het onderzoekgebied te trekken zijn.

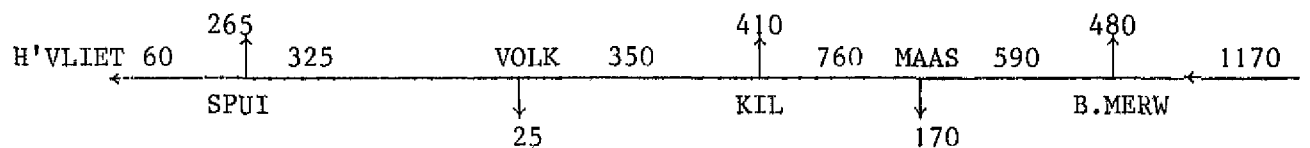
Er is daarom getracht de informatie over de processen in het onderzoekgebied niet via het opstellen van balansen, maar via een beschouwing van het verloop van de concentratie te verkrijgen. Het berekende verloop van de afvoer uit het DELTAR-model dient daarbij slechts als een hulpmiddel te worden beschouwd.

Teneinde afvoeren, snelheden en oppervlakte van dwarsdoorsneden, die in het onderzoekgebied optreden, vast te stellen, worden 3 situaties beschouwd: gemiddelde, lage en hoge afvoer bij Lobith. De gemiddelde afvoer heeft betrekking op de periode 1972^x + 1973. De verdeling van de afgevoerde hoeveelheid water wordt beschreven in nota "Afvoergegevens Noordelijk Deltabekken" (lit. 5). De aldus verkregen afvoer wordt ook wel DELTAR-afvoer genoemd.

Het onderzoekgebied wordt nu in 5 vakken verdeeld:



A) Gemiddelde afvoer: $Q_{\text{Lobith}} \approx 1600 \text{ m}^3/\text{s}$: De afvoerverdeling is dan (DELTAR):



Voor de situatie met een gemiddelde afvoer is nog wel iets te zeggen over de verblijftijden in de diverse vakken (lit. 1). Daarbij wordt vak 1 en 2 als één geheel beschouwd. De lengte van dit vak is 30 km en van de overige 15 km.

Met de gegevens van verblijftijd, vaklengte en afvoer kan de gemiddelde snelheid worden berekend.

5	4	3	2	1		vaknummer
15	15	15	30	-		lengte (km)
60	325	350	760	590	1170	afvoer (m^3/s)
20,3	8,2	5,4	2,6	-		verblijftijd (dg)
0,85	2,1	3,2	13,3	26,6		snelheid (m/s)

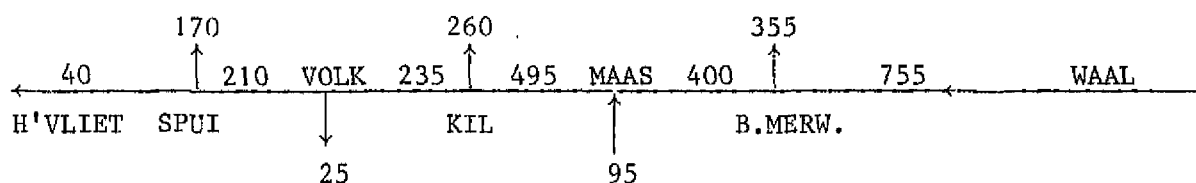
Hierbij is aangenomen dat de oppervlakte van de dwarsdoorsnede vóór en na het splitsingspunt Boven/Nieuwe Merwede gelijk is.

Wordt de afvoer, snelheid en oppervlakte van de dwarsdoorsnede bij Gorkum respectievelijk Q_0 , u_0 en A_0 gekozen, dan is de relatieve verandering:

5	4	3	2	1		vaknummer
0,05 Q_0	0,28 Q_0	0,30 Q_0	0,65 Q_0	0,5 Q_0	Q_0	afvoer
1,6 A_0	3,5 A_0	2,5 A_0	1,3 A_0	A_0	A_0	oppervlakte
0,03 u_0	0,08 u_0	0,12 u_0	0,5 u_0		u_0	snelheid

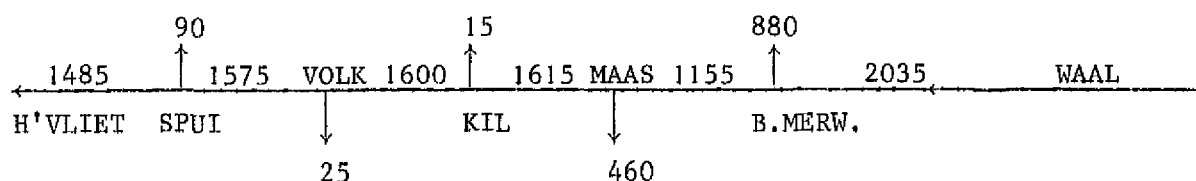
B) Lage afvoer: $Q_{\text{Lobith}} \approx 1000 \text{ m}^3/\text{s}$

Voor lage afvoer is kwantitatief weinig bekend over verblijftijden. Om toch een schatting van de (relatieve) snelheid in de diverse vakken te kunnen maken, wordt aangenomen dat de verhoudingen van de dwarsdoorsneden A dezelfde zijn als bij gemiddelde afvoer. Met de DELTAR-afvoerverdeling is dan eenvoudig de relatieve snelheid af te leiden.



5	4	3	2	1		vaknummer
0,05 Q_0	0,28 Q_0	0,30 Q_0	0,65 Q_0	0,5 Q_0	Q_0	afvoer
1,6 A_0	3,5 A_0	2,5 A_0	1,3 A_0	A_0	A_0	oppervlakte
0,03 u_0	0,08 u_0	0,12 u_0	0,5 u_0		u_0	snelheid

C) Hoge afvoer: $Q_{\text{Lobith}} = 3000 \text{ m}^3/\text{s}$



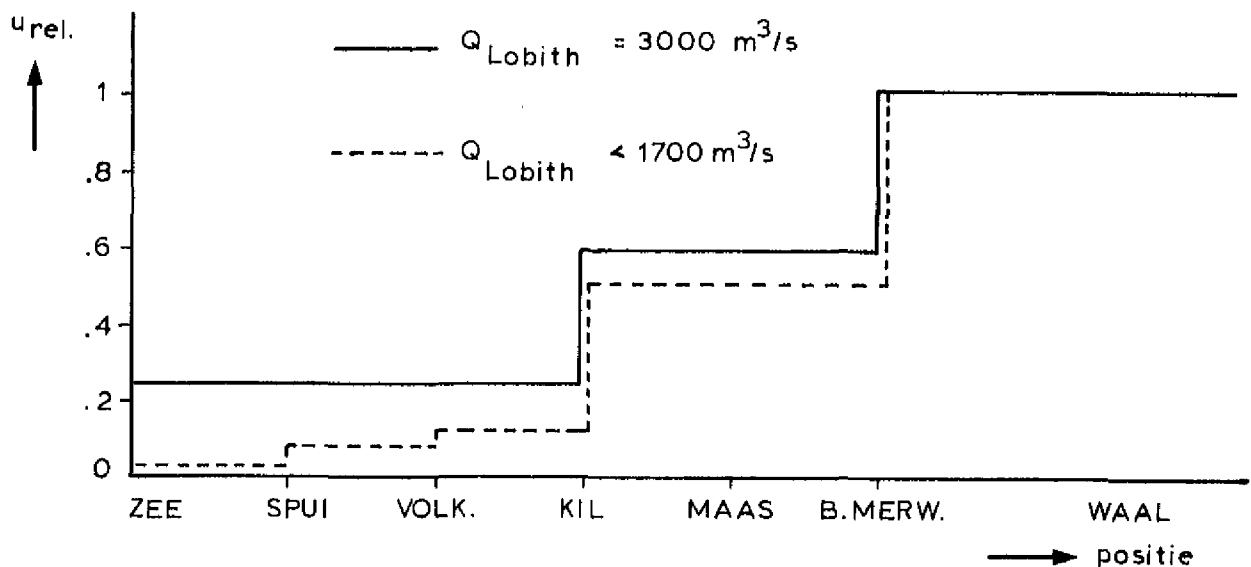
Ook bij hoge afvoeren zijn geen verblijftijden bekend.

Nu blijkt dat bij hoge Lobith-afvoer slechts een kleine hoeveelheid water door Kil en Spui wordt afgevoerd; nagenoeg al het water wordt via de Haringvlietsluizen naar zee afgevoerd.

Met de schatting $A_3 \approx A_4 \approx A_5 \approx 3 A_0$ kan de stroomsnelheid ook voor hoge Lobith-afvoeren worden berekend:

5	4	3	2	1		vaknummer
$0,73 Q_0$	$0,77 Q_0$	$0,79 Q_0$	$0,79 Q_0$	$0,57 Q_0$	Q_0	afvoer
$3 A_0$	$3 A_0$	$3 A_0$	$1,3 A_0$	A_0	A_0	oppervlakte
$0,24 u_0$	$0,26 u_0$	$0,26 u_0$	$0,60 u_0$		u_0	snelheid

Het verloop van de relatieve stroomsnelheid $u_{rel.} = u/u_0$ binnen het onderzoekgebied voor hoge, gemiddelde en lage afvoer bij Lobith is weergegeven in figuur 2.4.



Figuur 2.4: Geschematiseerd verloop van de relatieve stroomsnelheid in het Hollands Diep, Haringvliet en Nieuwe Merwede.

De werkelijke afname van de relatieve stroomsnelheid in westelijke richting zal een vloeiender verloop hebben.

Uit figuur 2.4 blijkt allereerst dat de relatieve stroomsnelheid op het traject Nieuwe Merwede-Hollands Diep-Haringvliet sterk afneemt. Tevens blijkt dat de afname geringer is naarmate de afvoer bij Lobith hoger is, hetgeen illustreert dat het lozingsprogramma van de Haringvlietssluisen de waterhuishouding in het Hollands Diep en Haringvliet in zeer sterke mate bepaald. Dit is in overeenstemming met de in paragraaf 2.1 beschreven overgang van een semi-stagnant bekken bij lage Lobith-afvoer en gesloten

Haringvlietsluizen naar een rivier bij hoge Lobith-afvoer en geopende Haringvlietsluizen.

2.3 Kwalitatieve aspecten in relatie tot de afvoer

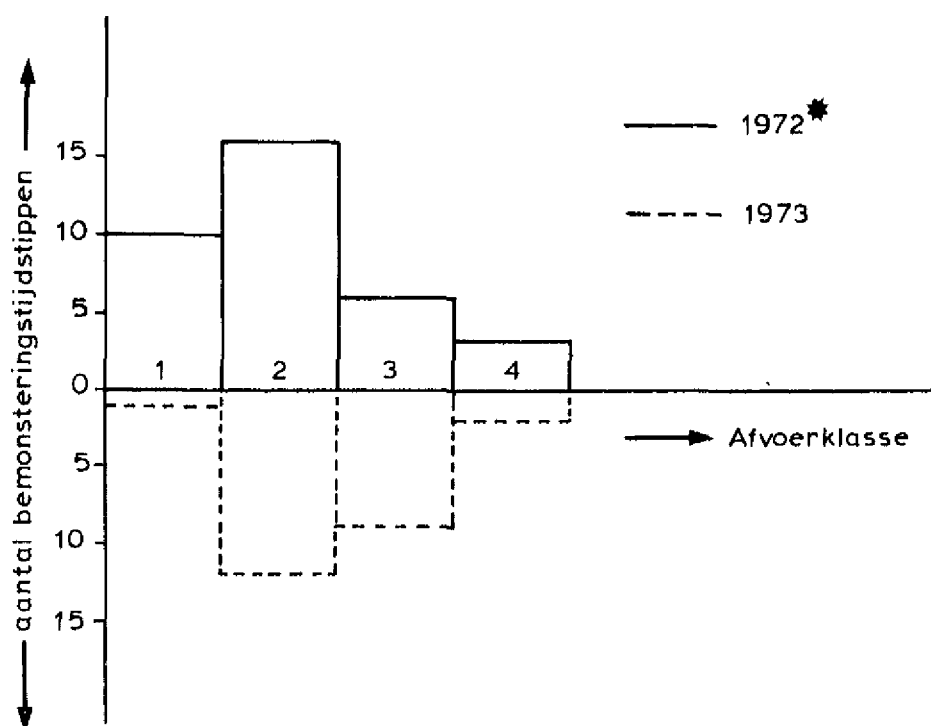
Uitgaande van de waterhuishoudkundige situatie in het onderzoekgebied worden nu de waterkwaliteitsparameters chloride, totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof in relatie tot de afvoer nader beschouwd.

Daarvoor wordt gebruik gemaakt van de gegevens uit twee in hydrologisch opzicht sterk verschillende perioden: 1972^x met een relatief lage afvoer en 1973 met een relatief hoge afvoer. Naast de gemiddelde concentraties van de beschouwde waterkwaliteitsparameters in de perioden 1972^x en 1973 afzonderlijk en als één geheel, worden in de figuren 2.5 t/m 2.16 de gemiddelde concentraties berekend in vier verschillende afvoerklassen. De daarbij gehanteerde indeling in afvoerklassen is dezelfde als welke door de projectgroep Hollands Diep-Haringvliet is gebruikt (lit. 1).

afvoerklasse	afvoer bij Lobith
K = 1	$Q_{\text{Lobith}} < 1000 \quad (\text{m}^3/\text{s})$
K = 2	$1000 < Q_{\text{Lobith}} < 1700 \quad (\text{m}^3/\text{s})$
K = 3	$1700 < Q_{\text{Lobith}} < 2200 \quad (\text{m}^3/\text{s})$
K = 4	$Q_{\text{Lobith}} > 2200 \quad (\text{m}^3/\text{s})$

De afvoer bij Lobith twee dagen vòòr het tijdstip van bemonstering wordt bepalend geacht voor de afvoerklasse die behoort bij de in het onderzoekgebied gemeten concentratie.

Onderstaand histogram (fig. 2.17) geeft aan hoe de verdeling van de beschouwde bemonsteringstijdstippen uit 1972^x en 1973 over de vier afvoerklassen is.



Figuur 2.17: Het aantal bemonsteringstijdstippen per afvoerklasse in de perioden 1972^x en 1973.

Uit het histogram valt direct af te lezen, dat de afvoer in 1973 gemiddeld hoger is geweest dan in 1972^x.

Helaas zijn de in figuur 2.5 t/m 2.16 vermelde gemiddelde concentraties van afvoerklasse 1 en 4 onnauwkeurig, omdat er slechts een beperkt aantal bemonsteringsgegevens in die afvoerklassen beschikbaar zijn. Indien er voor de bepaling van een gemiddelde concentratie minder dan de helft van het maximale aantal gegevens in één klasse beschikbaar was, is geen eindresultaat vermeld. In het navolgende wordt het verloop van de beschouwde stoffenchloride, totaal-fosfaat, orthofosfaat en zwevende stof kort uiteengezet.

Chloride (figuren 2.5; 2.6; en 2.7)

Het verloop van de chlorideconcentratie vertoont in 1972^x en 1973 hetzelfde karakteristieke beeld: een konstant gehalte op de Nieuwe Merwede en Amer, vervolgens een verlaging nabij de Moerdijk als gevolg van het samenvloeien van Nieuwe Merwede en Amer en na de Moerdijk een toename van de chlorideconcentratie in westelijke richting, als gevolg van zoutindringing via de Haringvlietsluizen en de Volkeraksluizen.

De gemiddelde concentraties van het (konservatieve) chloride liggen in 1972^x hoger dan in 1973, hetgeen overeenkomt met de verwachting op grond van de

relatief lage afvoer in 1972^x bij een nagenoeg gelijke chloridevracht in 1972^x en 1973. Een indeling in 4 afvoerklassen toont eveneens deze omgekeerde evenredigheid aan. De concentratie wordt dus zeer sterk door de afvoer bepaald. Bovendien tonen de figuren 2.18 t/m 2.21, waarin de concentraties van 4 stations tegen elkaar zijn uitgezet, aan dat ieder station op identieke wijze door de afvoer wordt beïnvloed.

Eveneens blijkt uit de figuren 2.5 t/m 2.7 dat het karakteristieke verloop van de concentratie van chloride in het onderzoekgebied in een willekeurige afvoerklasse overeenkomt met het reeds eerder geschetste verloop.

Totaalfosfaat (figuren 2.8; 2.9; en 2.10)

Het verloop van de gemiddelde concentratie aan totaalfosfaat als functie van de plaats geeft in 1972^x hetzelfde beeld te zien als in 1973: een voortdurende afname van de concentratie in westelijke richting.

De afname van het traject Nieuwe Merwede-Hollands Diep-Haringvliet is zo groot, dat de gemiddelde concentratie bij de Haringvlietsluizen een faktor 2 lager is dan bij Gorkum.

De gemiddelde concentraties aan totaalfosfaat in 1972^x (waarin de afvoer relatief laag was) zijn enigszins lager dan in 1973, dit in tegenstelling tot het chloride.

De relatie tussen de concentratie aan totaalfosfaat en de afvoer is veel minder dan bij chloride, hetgeen valt af te leiden uit de indeling in afvoerklassen.

Het verloop van de concentratie als functie van de plaats verschilt per afvoerklasse: de afname op het beschouwde traject is groter naarmate de afvoer lager is. Als bijzonderheid kan nog vermeld worden, dat de gemiddelde concentratie bij de Haringvlietsluizen in iedere afvoerklasse nagenoeg dezelfde waarde heeft, terwijl de concentratie bij Gorkum in sterke mate varieert (lit. 9).

Orthofosfaat (figuren 2.11; 2.12; en 2.13)

Het verloop van de orthofosfaatconcentratie als functie van de plaats vertoont grote overeenkomst met het verloop van de totaalfosfaatconcentratie: ook het orthofosfaatgehalte neemt op het traject Nieuwe Merwede-Hollands Diep-Haringvliet voortdurend af in westelijke richting.

De relatieve afname is van dezelfde ordegrootte als bij totaalfosfaat. De verhouding totaalfosfaat/orthofosfaat is ongeveer 5:3 en wijzigt zich nagenoeg niet binnen het onderzoekgebied.

Orthofosfaat lijkt evenals totaalfosfaat in geringe mate afhankelijk van de afvoer.

Het zwevend stofgehalte (figuren 2.14; 2.15; en 2.16)

Uit het overzicht van de gemiddelde concentraties aan zwevend stof blijkt het beschouwde traject in twee sterk verschillende delen te kunnen worden gesplitst. Op de Nieuwe Merwede vindt een zeer grote afname van het gehalte in westelijke richting plaats, terwijl de concentratie in het Hollands Diep en het Haringvliet slechts weinig afneemt.

Hoewel een indeling in afvoerklassen duidelijk maakt dat hoge concentraties aan zwevend stof voorkomen in hoge afvoerklassen, blijken de gemiddelde concentraties van 1972^x (relatief lage afvoer) en 1973 nauwelijks te verschillen.

3 Het konzentratieverloop uitgaande van de basisvergelijkingen

3.1 Inleiding

In het vorige hoofdstuk is een overzicht gegeven van de gemiddelde konzentratie van het chloride, totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof als funktie van de plaats en als funktie van plaats en afvoer.

Misschien is het echter mogelijk om, uitgaande van de basisvergelijkingen voor kontinuïteit, beweging en vracht, direkt van het konzentratieverloop als funktie van plaats, tijd, afvoer, etc. te bepalen.

3.2 De basisvergelijkingen

De basisvergelijkingen voor kontinuïteit en stoftransport zijn:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} - q = 0 \quad (3.2.1)$$

$$\frac{\partial (Ac)}{\partial t} + \frac{\partial (uAc)}{\partial x} = (P + R)A \quad (3.2.2)$$

In deze vergelijkingen stelt Q de afvoer, q de lozing per lengte-eenheid, u de stroomsnelheid, A de oppervlakte van de dwarsdoorsnede van de rivier, c de konzentratie van de beschouwde stof, x de positie op het beschouwde trajekt en t de tijd voor. De bron- of putterm wordt voorgesteld door P en de reaktieterm door R .

De bronterm bevat tevens de bijdrage door diffusie of dispersie.

Om na te gaan of en wanneer de bergingsterm verwaarloosbaar is, worden de volgende tijdschalen gedefinieerd, waarmee de termen van de kontinuïteitsvergelijking geschat worden.

$$T_0 = \text{tijdschaal waarop de afvoer bij Lobith een bepaald percentage of faktor varieert} \quad (3.2.3)$$

$$T_v = \text{verblijftijd binnen een bepaald gebied} \quad (3.2.4)$$

Voor de situatie op het trajekt Lobith-Haringvlietsluizen blijkt de lozingsterm q uit de kontinuïteitsvergelijking verwaarloosbaar op de trajekten waar geen splitsings- of samenvloeiïngspunten voorkomen. Indien de kontinuïteits-

vergelijking wordt beschouwd op een traject met lengte L_0 , dwarsdoorsnede A_0 , waarop een peilvariatie Δh op $x = x_0$ wordt geregistreerd binnen de tijdschaal T_0 , kan het verband tussen de verandering van de afvoer op $x = x_0$ en de verandering op het traject met lengte L_0 worden weergegeven door:

$$\left(\frac{\Delta A}{T_0}\right)_{x=x_0} = \left(\frac{\Delta Q}{L_0}\right)_{\text{traject}} \quad (3.2.5)$$

Bovendien geldt op $x = x_0$:

$$\frac{\Delta Q}{Q_0} = \frac{\Delta u}{u_0} + \frac{\Delta A}{A_0} \quad (3.2.6)$$

Indien wordt aangenomen dat een verandering in de afvoer alleen een verandering in de oppervlakte A tot gevolg heeft, geldt

$$\left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{x=x_0} = \left(\frac{\Delta A}{A}\right)_{x=x_0} \quad (3.2.7)$$

Wordt de verblijftijd gedefinieerd als

$$T_v = \frac{A_0 L_0}{Q} \quad (3.2.8)$$

waarbij Q de afvoer op het beschouwde traject is, kan vergelijking (3.2.5) worden geschreven als

$$\left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{\text{traject}} = \frac{T_v}{T_0} \left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{x=x_0} \quad (3.2.9)$$

Hieruit blijkt dat de berging verwaarloosbaar klein is, indien de relatieve verandering in de afvoer op een bepaalde plaats klein is of als geldt:

$$T_v \ll T_0 \quad (3.2.10)$$

De afvoer op het beschouwde traject kan dan als quasi-stationair worden beschouwd. Indien echter een situatie wordt beschouwd waarbij

$$T_v \gg T_0 \quad (3.2.11)$$

is vergelijking (3.2.9) niet meer geldig.

Indien de verblijftijd T_v zodanig is, dat de afvoer op $x = x_0$ juist maximaal

is en de afvoer op $x = x_0 + L_0$ nog onveranderd, is de relatieve verandering van de afvoer over het beschouwde traject maximaal en gelijk aan:

$$\left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{\text{traject}}^{\text{max}} = \left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{x=x_0}^{\text{max}} \quad (3.2.12)$$

waarbij ΔQ_{max} de amplitude van de variatie in de afvoer is.

Toepassing van vergelijking (3.2.9) en (3.2.12) op de situatie in het Hollands Diep en Haringvliet is mogelijk als wordt verondersteld dat de relatieve debietsvariatiën bij Lobith en Gorkum gelijk zijn:

$$\left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{\text{Lobith}} = \left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)_{\text{Gorkum}} \quad (3.2.13)$$

De variatie van de afvoer bij Lobith blijkt volgens figuur 2.3 soms 50% of meer te bedragen, waarbij de tijdschaal T_0 een ordegröte van 14 dagen en soms zelfs minder heeft.

Voor beschouwing van de toestand in het Hollands Diep en Haringvliet worden twee situatiën onderscheiden:

a) Haringvlietsluizen geopend

De Haringvlietsluizen worden geopend als de afvoer bij Lobith groter is dan $1700 \text{ m}^3/\text{s}$. De verblijftijd op het traject Gorkum-Haringvlietsluizen heeft dan een ordegröte van 3 dagen. Nadere analyse van de afvoer toont aan dat bij een tijdschaal van 3 dagen relatieve variatiën in de afvoer bij Gorkum van 15% voorkomen. Omdat de verblijftijd in een dergelijke situatie kleiner is dan de tijdschaal, waarop de variatiën in de afvoer plaatsvinden, kan volgens vergelijking (3.2.9) berekend worden dat op dit traject debietsvariatiën van 15% voorkomen.

b) Haringvlietsluizen gesloten

Een lage afvoer bij Lobith heeft een zeer grote verblijftijd op het traject Moerdijk-Haringvlietsluizen tot gevolg. De verblijftijd is in het algemeen groter dan de tijdschaal, waarop verandering van de afvoer bij Gorkum plaatsvindt.

Voor beschouwing van de relatieve variatiën in de afvoer op dit traject moet daarom vergelijking (3.2.12) worden gehanteerd. Relatieve variatiën in de afvoer op dit traject kunnen soms dan ook zelfs groter dan 50% zijn. Het is duidelijk dat de aanname $u = \text{konstant}$ hier niet meer opgaat, echter wordt de snelheidsverandering relatief gezien even groot geacht als de verandering in de dwarsdoorsnede, dan nog komen debietsvariatiën van 25% voor.

Als debietsvariaties van 15% nog toelaatbaar worden geacht, kan de situatie op het traject Gorkum-Haringvlietsluizen als quasi-stationair worden beschouwd, indien de afvoer bij Lobith groter is dan $1700 \text{ m}^3/\text{s}$.

Is de afvoer bij Lobith geringer dan $1700 \text{ m}^3/\text{s}$, dan zijn de variaties in de afvoer relatief zo groot, dat de stromingstoestand niet meer als quasi-stationair kan worden beschouwd.

Indien de toestand in het Hollands Diep en Haringvliet toch als quasi-stationair wordt beschouwd (geen berging), worden de resultaten van een met bovenstaande aanname opgestelde waterbalans onnauwkeurig. Dit betekent dat met de huidige betrouwbaarheid van de afvoer met behulp van massabalans-technieken geen betrouwbare informatie over processen in het onderzoeksgebied kan worden verkregen.

Een volgende stap, die wellicht meer informatie over het verloop van de concentratie als functie van de plaats en daarmee informatie over processen kan opleveren, is de ontkoppeling van afvoer en concentratie: getracht zal worden de concentratie als functie van plaats en tijd te beschrijven of:

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

3.3 Het concentratieverloop in een quasi-stationaire situatie

In een quasi-stationaire toestand kunnen de basisvergelijkingen

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} - q = 0 \quad (3.3.1)$$

$$\frac{\partial (Ac)}{\partial t} + \frac{\partial (Qc)}{\partial x} = (P + R)A \quad (3.3.2)$$

geschreven worden als

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (3.3.3)$$

$$\frac{\partial (Qc)}{\partial x} = (P + R)A \quad (3.3.4)$$

De term $\frac{\partial (Ac)}{\partial t}$ kan onder dezelfde kondities worden verwaarloosd als waar-
onder $\frac{\partial A}{\partial t}$ is verwaarloosd, indien wordt aangenomen dat de tijdschalen voor

verandering van de afvoer en concentratie gelijk zijn.

Uit literatuur 1 en 2 blijkt dat vrijwel alle lozingen in het onderzoek-
gebied kunnen worden verwaarloosd ($\frac{\partial Q}{\partial x} = 0$), behalve bij splitsings- of
samenvloeiingspunten, zoals Spui, Kil, Volkerak- en Haringvlietsluizen
($\frac{\partial Q}{\partial x} \neq 0$).

De bron- of putterm (N.B.: een sedimentatieproces wordt als een reactie be-
schouwd!) uit vergelijking (3.3.4) kan ten behoeve van de beschouwing van
lozingen nog gesplitst worden in een term P_1 waarbij alleen lozing of ont-
trekking van water plaatsvindt met een concentratie die gelijk is aan de
concentratie in de hoofdstroom ($\frac{\partial c}{\partial x} = 0$ bij een lozingspunt) en een term P_2
waarbij de lozingen een zodanig karakter hebben, dat de concentratie in de
hoofdstroom erdoor wordt gewijzigd ($\frac{\partial c}{\partial x} \neq 0$ bij een lozingspunt).

Samengevat:

$$P = P_1 + P_2 ; \quad \frac{\partial(Qc)}{\partial x} = (P_1 + P_2 + R)A \quad (3.3.5)$$

- Op trajekten zonder lozingen, onttrekkingen of splitsingen geldt dan:

$$P = P_1 + P_2 = 0 \quad \text{en} \quad \frac{\partial Q}{\partial x} = 0$$

met als gevolg

$$Q \frac{\partial c}{\partial x} = R.A \quad \rightarrow \quad \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{R}{u} \quad (\text{niet-konservatieve stoffen}) \quad (3.3.6)$$

Voor conservatieve stoffen ($R = 0$) geldt blijkbaar

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial x} &= 0 \\ \text{of} & \\ c &\neq c(x) \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

- Op trajekten met een lozingspunt kan verondersteld worden dat de verande-
ring van de vracht Qc ten gevolge van reacties klein is ten opzichte van
lozingen.

Bij passage van een lozingspunt geldt bij benadering

$$\frac{\partial(Qc)}{\partial x} = (P_1 + P_2)A \quad (3.3.8)$$

met

$$c \frac{\partial Q}{\partial x} = c \cdot q = P_1 \cdot A$$

(3.3.9)

$$Q \frac{\partial c}{\partial x} = P_2 \cdot A$$

Uit de beschikbare gegevens van chloride (figuur 2.1) blijkt dat het concentratieverloop bij de Moerdijkbrug, waar de Maas (Amer) en de Nieuwe Merwede samenkomen, een sprong vertoont.

Het Maaswater kan in deze situatie worden opgevat als een lozing van water met een relatief laag chloridegehalte op de Nieuwe Merwede.

Voor dit lozingspunt geldt dus

$$P_2 \neq 0 ; \frac{\partial c}{\partial x} \neq 0 ; P_1 \neq 0.$$

Hetzelfde geval doet zich voor bij de Haringvliet- en Volkeraksluizen, waar zeewater met een hoog chloridegehalte het onderzoekgebied binnendringt, waardoor een merkbare concentratieverhoging optreedt.

In een dergelijk geval kan het concentratieverloop zonder nadere informatie omtrent de lozing niet theoretisch worden afgeleid. Alhoewel een verhoging van het chloridegehalte nabij de Haringvlietssluiden in principe verklaard kan worden door interactie van een advektie en diffusie of dispersieproces, blijkt de concentratieverandering in de praktijk zodanig groot, dat naar een andere verklaring moet worden gezocht.

Daar de penetratie van zout water via de Haringvlietssluiden resulteert in een relatief zoute onderlaag in het beschouwde gebied, kan de concentratieverhoging wellicht verklaard worden met behulp van een "zijdelingse lozing" van zout water vanuit de onderlaag, waarbij de intensiteit van deze lozing afneemt naarmate de afstand tot deze sluizen groter is.

Voor de stoffen totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof blijkt geen duidelijk waarneembaar verschil in concentratie in de Nieuwe Merwede en Amer. Derhalve kan voor deze stoffen bij genoemd lozingspunt worden aangenomen dat:

$$P_2 = 0 \text{ en } \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \text{ maar } P_1 \neq 0.$$

Met behulp van vergelijking (3.3.9) kan worden afgeleid:

$$c \frac{\partial Q}{\partial x} = c \cdot q = P_1 \cdot A \quad \text{en} \quad \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (3.3.10)$$

Lozingen hebben in een dergelijk geval geen invloed op het concentratieverloop. Samengevat geldt in een quasi-stationaire situatie zonder lozingen voor de niet-konservatieve stoffen totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{R}{u} \quad (3.3.11)$$

waarbij de stroomsnelheid u afhankelijk van de plaats kan zijn.

Voor de conservatieve stof chloride geldt in bovengenoemde situatie

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (3.3.12)$$

Bij de lozingspunten Volkeraksluizen, Haringvlietsluizen en Moerdijk (Amer) geldt voor het chloridegehalte echter

$$\frac{\partial c}{\partial x} \neq 0 \quad (3.3.13)$$

Zonder nadere informatie over de kwantiteit en kwaliteit van het geloosde of gespuide water kan het concentratieverloop niet nader worden uitgewerkt.

3.4 Het concentratieverloop bij een 1^e orde proces

3.4.1 Algemeen

In het vorige hoofdstuk zijn de basisvergelijkingen uitgewerkt, waarbij gebruik gemaakt is van diverse aannamen. Duidelijk is dat het slechts mogelijk is iets over de concentratie als functie van plaats en tijd af te leiden, als de lozingen geen invloed op de concentratie hebben en de toestand (quasi-) stationair is (vergelijking (3.3.3) en (3.3.4)).

Met behulp van deze vergelijkingen zal getracht worden het concentratieverloop theoretisch af te leiden, waarbij wordt aangenomen dat mogelijke processen 1^e orde processen zijn ($R = -kc$) en dat de bron- of putterm P (en dus de bijdrage door dispersie) verwaarloosbaar is ten opzichte van de reactie-term ($P = 0$).

3.4.2 Het concentratieverloop bij konstante stroomsnelheid u

Bij een konstante stroomsnelheid u kunnen de vergelijkingen

$$\frac{\partial uA}{\partial x} = 0 \quad (3.4.1)$$

en

$$\frac{\partial (uAc)}{\partial x} = -kAc \quad (3.4.2)$$

worden geschreven als

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = -kc \quad (3.4.3)$$

met als oplossing

$$c(x) = c(x_0) e^{-\frac{k}{u}(x-x_0)} \quad ; \quad \frac{dx}{dt} = u = \text{konstant} \quad (3.4.4)$$

of met $x_0 = 0$

$$c(x,t) = c(0,t) e^{-\frac{k}{u}x} \quad ; \quad \frac{dx}{dt} = u = \text{konstant} \quad (3.4.5)$$

waarbij k een sedimentatiekonstante voorstelt.

Het concentratieverloop kan dus worden opgevat als het produkt van een tijd-functie $c(0,t)$ en een plaatsfunctie $\exp(-kx/u)$. Nu is de stroomsnelheid in werkelijkheid afhankelijk van de tijd en van de plaats (zie hoofdstuk 2). De gevolgen voor het concentratieverloop worden in het navolgende behandeld.

3.4.3 Het concentratieverloop bij een plaatsafhankelijke stroomsnelheid

Indien de stroomsnelheid u niet konstant is, maar bijvoorbeeld plaatsafhankelijk, moeten twee gevallen worden onderscheiden:

$$A) \quad \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad \rightarrow \quad u \frac{\partial A}{\partial x} = -A \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.4.6)$$

De snelheid verandert ten gevolge van veranderingen in de oppervlakte van de dwarsdoorsnede.

Het is eenvoudig te zien dat de oplossing van (3.3.4) in dit geval is:

$$c(x,t) = c(0,t) e^{-k \int_0^x \frac{1}{u(\chi)} d\chi} \quad (3.4.7)$$

$$B) \quad \frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{\partial uA}{\partial x} = q(x)$$

De afvoer is plaatsafhankelijk ten gevolge van tijdsonafhankelijke lozingen. Als wordt aangenomen dat de concentratie c van hoofdstroom en lozing gelijk is, kan vergelijking (3.3.4) worden geschreven als:

$$\frac{\partial (uAc)}{\partial x} = cq(x) - kAc \quad (3.4.8)$$

welke na uitwerking overeenkomt met vergelijking (3.4.3):

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = -kc \quad (3.4.9)$$

De oplossing van (3.4.9) is gelijk aan (3.4.7).

Geval A en B leiden tot dezelfde uitkomst: de invloed van lozingen of onttrekkingen van een hoeveelheid water met concentratie c hebben dezelfde gevolgen voor het concentratieverloop als veranderingen in de dwarsdoorsnede bij konstante afvoer.

Het concentratieverloop kan in beide gevallen wederom worden opgevat als het produkt van een tijdfunctie en een plaatsfunctie.

Lozingen met een concentratie die afwijkt van de concentratie c in de hoofdstroom moeten per geval worden beschouwd.

3.4.4 Het concentratieverloop bij tijdsafhankelijke stroomsnelheid

Als de stroomsnelheid tijdsafhankelijk is, kan slechts in de gevallen waarin de quasi-stationaire toestand gehandhaafd blijft, iets over het concentratieverloop worden afgeleid!

Dit houdt in dat de stroomsnelheid zodanig langzaam moet veranderen, dat deze binnen het beschouwde gebied overal gelijk is en niet verandert gedurende de monsternamen.

$$u(x,t) = u(t)$$

Op ieder bemonsteringstijdstip geldt nu het concentratieverloop (3.4.5), waarin echter de stroomsnelheid u de bovenstaande gedaante heeft:

$$c(x,t) = c(0,t) e^{-\frac{kx}{u(t)}} \quad (3.4.10)$$

3.4.5 Het concentratieverloop bij tijds- en plaatsafhankelijke stroomsnelheid

De praktijksituatie kan bij de beschouwing van een bepaald traject wellicht als quasi-stationair worden beschouwd, met een concentratieverloop volgens vergelijking (3.4.10).

De moeilijkheid bij de beschouwing van het onderzoeksgebied is dat de stroom zich dikwijls vertakt (Spui, Kil, Amer), waardoor de stroomsnelheid niet alleen tijds- maar ook plaatsafhankelijk is. Slechts indien wordt aangenomen dat in het geval van vertakkingen de toestand quasi-stationair blijft en dat de stroomsnelheid kan worden beschreven door

$$u(x,t) = u(x) \cdot u(t) \quad (3.4.11)$$

kan met behulp van (3.4.2) voor het concentratieverloop worden afgeleid:

$$c(x,t) = c(0,t) e^{-k \left(\int_0^x \frac{1}{u(\chi)} d\chi \right) \frac{1}{u(t)}} \quad (3.4.12)$$

Het is onbekend in hoeverre (3.4.11) een realistische benadering van de werkelijkheid is.

De sedimentatiekonstante k kan nog een functie van plaats en tijd zijn: voor het Hollands Diep-Haringvliet worden alleen plaatsafhankelijke sedimentatiekonstanten in beschouwing genomen. Uitgaande van (3.4.2) blijkt het concentratieverloop in een dergelijke situatie te kunnen worden geschreven als

$$c(x,t) = c(0,t) e^{- \left(\int_0^x \frac{k(\chi)}{u(\chi)} d\chi \right) \frac{1}{u(t)}} \quad (3.4.13)$$

3.5 Het concentratieverloop in niet-quasi-stationaire situaties

Kan de situatie niet als quasi-stationair worden opgevat, dan mogen de termen $\frac{\partial A}{\partial t}$ en $\frac{\partial(Ac)}{\partial t}$ uit de vergelijkingen (3.3.1) en (3.3.2) niet meer verwaarloosd worden. Een mogelijkheid om in die gevallen de toestand in het onderzoekgebied te beschrijven, is integratie van de balansvergelijking

$$\frac{\partial(Ac)}{\partial t} + \frac{\partial(uAc)}{\partial x} = -kAc \quad (3.5.1)$$

met als resultaat

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left(\frac{\partial(Ac)}{\partial t} + \frac{\partial(uAc)}{\partial x} \right) dt &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{\partial(Ac)}{\partial t} dt + \frac{1}{T} \int_0^T \frac{\partial(uAc)}{\partial x} dt = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{(Ac)_0^T}{T} + \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{\partial(uAc)}{\partial x} dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{\partial(uAc)}{\partial x} dt \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Door het middelen over een voldoende lange periode met instationaire situaties wordt dus informatie verkregen over het concentratieverloop in een stationaire toestand!

4 Modelbenadering

4.1 Het algemene model

4.1.1 Inleiding

In het voorgaande werd gesignaleerd dat de concentratie wellicht kan worden opgevat als het produkt van een tijds- en plaatsafhankelijke funktie. Er wordt dus verondersteld dat de concentratie kan worden geschreven als:

$$f(x) \cdot c(t) \quad (4.1.1.1)$$

Hierin is $c(t)$ evenredig met het concentratieverloop van een referentiestation of met de gemiddelde concentratie van een bepaald gebied op tijdstip t . Het model zal goed voldoen als blijkt dat

$$\frac{\partial f(x)}{\partial t} = 0 \quad \text{en} \quad \frac{\partial c(t)}{\partial x} = 0 \quad (4.1.1.2)$$

Hetgeen inhoudt dat de vorm of gedaante van $f(x)$ op verschillende tijdstippen t dezelfde moet zijn en de tijdreeksen $c(t)$ op verschillende stations eveneens. Dit model zal slechts dan goede resultaten geven als de stations een zeer sterke onderlinge koppeling hebben.

Het vermoeden is dat dit in het HD/HV gebied het geval is, waarbij de situatie bij Lobith waarschijnlijk bepalend is voor de situatie in het onderzoeksgebied en daarmee voor het referentiestation.

Het beoordelen van de geldigheid van het model kan geschieden door te bezien wat de spreiding is in de funkties $f(x)$ en $c(t)$ of door te bezien of $f(x)$ afhangt van de keuze van de periode waaruit $f(x)$ bepaald wordt. Uiteraard is ook de schatting van de concentratie uitgaande van de berekende $f(x)$ en $c(t)$ een maat voor de juistheid van het model.

Voldoet het gekozen model goed dan is daarmee een tijdsonafhankelijk beeld (weliswaar relatief) van het beschouwde gebied verkregen. Dit is bijzonder belangrijk bij het beschouwen van processen die binnen het onderzoeksgebied plaatsvinden. Gezien de koppeling HD/HV met Lobith valt te verwachten dat de funktie $c(t)$ gekoppeld kan worden aan het concentratieverloop bij Lobith.

4.1.2 Schattingsprocedures van het algemene model

In het voorgaande is verondersteld dat de concentratie $c(x,t)$ op de plaats x ten tijde t beschreven kan worden door

$$c(x,t) = f(x) c(t) \quad (4.1.2.1)$$

In het algemeen zal deze concentratie op een eindig aantal plaatsen x_i , $i = 1 \dots m$ en een eindig aantal tijdstippen t_j , $j = 1 \dots n$ gemeten worden. Uitgaande van (4.1.2.1) wordt verwacht dat voor deze metingen geldt

$$c(x_i, t_j) = c_{ij} = v_i w_j \quad (4.1.2.2)$$

met $v_i : f(x_i)$ en $w_j = c(t_j)$.

Ten gevolge van meetfouten en/of andere storingsbronnen zal echter worden waargenomen

$$\underline{c}_{ij} = v_i w_j + \underline{\epsilon}_{ij} \quad i = 1 \dots m, j = 1 \dots n \quad (4.1.2.3)$$

Verondersteld wordt, dat de $\underline{\epsilon}_{ij}$ normaal verdeelde onderling onafhankelijke stochastische variabelen zijn met verwachting nul en variantie σ_{ij}^2 .

Indien $\underline{C}$ de (stochastische) matrix $(\underline{c}_{ij})$, v en w , resp. de kolomvectoren $(v_1 \dots v_m)^T$ en $(w_1 \dots w_n)^T$, en $\underline{E}$ de (stochastische) matrix $(\underline{\epsilon}_{ij})$ voorstelt, dan is (4.1.2.3) te schrijven als

$$\underline{C} = v w^T + \underline{E} \quad (4.1.2.4)$$

Op basis van de waarnemingen $\underline{C}$ moeten schatters $\hat{v}$ en $\hat{w}$ ¹⁾ van v en w bepaald worden, zodanig dat

$$\underline{S} = ||\underline{C} - \hat{\underline{C}}||_{\underline{E}}^2 \quad (4.1.2.5)$$

minimaal is. Hierin is $\hat{\underline{C}} = \hat{v} \hat{w}^T$ en geeft $||\cdot||_{\underline{E}}$ de Euclidische matrix-norm aan, gegeven door

$$||X||_{\underline{E}}^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |x_{ij}|^2 = \text{tr}(XX^T) = \text{tr}(X^T X) \quad 2)$$

1) Omdat $\hat{v}$ en $\hat{w}$ berekend moeten worden uit de waarnemingen $\underline{c}_{ij}$ zullen deze schatters stochastische variabelen zijn.

2) Voor een vierkante matrix A geldt $\text{tr}(A) = \text{Spoor}(A) = \sum_i a_{ii} = \text{som van de diagonaalelementen van } A$.

Een noodzakelijke voorwaarde voor het minimaal zijn van S is dat

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \hat{v}_i} &= 0 & i &= 1 \dots m \\ \text{en} & & & \\ \frac{\partial S}{\partial \hat{w}_j} &= 0 & j &= 1 \dots n \end{aligned} \quad (4.1.2.6)$$

Hieraan is voldaan als

$$\begin{aligned} \underline{\hat{v}} &= \underline{C} \frac{\underline{\hat{w}}}{||\underline{\hat{w}}||^2} \\ \text{en} & & & \\ \underline{\hat{w}} &= \underline{C}^T \frac{\underline{\hat{v}}}{||\underline{\hat{v}}||^2} \end{aligned} \quad (4.1.2.7)$$

$$\text{met } ||\underline{\hat{w}}||^2 = \sum_{j=1}^n |\hat{w}_j|^2 \quad \text{en} \quad ||\underline{\hat{v}}||^2 = \sum_{i=1}^m |\hat{v}_i|^2$$

Uit (4.1.2.7) volgt

$$\begin{aligned} \underline{\hat{v}} &= \underline{C} \underline{C}^T \underline{\hat{v}} / ||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2 \\ \text{en} & & & \\ \underline{\hat{w}} &= \underline{C}^T \underline{C} \underline{\hat{w}} / ||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2 \end{aligned} \quad (4.1.2.8)$$

Om S te minimaliseren moet

- $||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2$ een eigenwaarde zijn van $\underline{C} \underline{C}^T$ (en dus van $\underline{C}^T \underline{C}$);
- $\underline{\hat{v}}$ de bij deze eigenwaarde behorende eigen-vektor van $\underline{e} \underline{e}^T$ zijn; en
- $\underline{\hat{w}}$ de bij deze eigenwaarde behorende eigen-vektor van $\underline{e}^T \underline{e}$ zijn.

Aangezien $\underline{C} \underline{C}^T$ meerdere eigenwaarden heeft zal S verscheidene (relatieve) minima hebben. Aangetoond kan worden dat

$$\underline{S} = ||\underline{C}||_E^2 - ||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2 \quad (4.1.2.9)$$

zodat het absolute minimum van S bereikt wordt, indien $||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2$ gelijk is aan de maximale eigenwaarde $\mu_{\max}$ van $\underline{C} \underline{C}^T$.

De schattingsprocedure voor $\underline{\hat{v}}$ en $\underline{\hat{w}}$ kan dus samengevat worden als

- bepaal de maximale eigenwaarden $\mu_{\max}$ van $\underline{C} \underline{C}^T$;
- bepaal de bij $\mu_{\max}$ behorende eigen-vektoren $\underline{p}$ en $\underline{q}$ van resp. $\underline{C} \underline{C}^T$ en $\underline{C}^T \underline{C}$;
- kies $\underline{\hat{v}} = \delta_1 \underline{p}$ en $\underline{\hat{w}} = \delta_2 \underline{q}$, zodanig dat $||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2 = \mu_{\max}$.

Bij de keuze van de konstanten δ_1 en δ_2 echter treedt een onbepaaldheid op, omdat hierbij maar één voorwaarde is opgelegd, nl. dat $||\hat{v}||^2 ||\hat{w}||^2 = \mu_{\max}$. Deze onbepaaldheid is opgeheven door zowel p als q te normeren, zodat $\underline{C}$ gerekonstrueerd wordt door

$$\underline{\hat{C}} = \underline{\hat{\lambda}}_0 \underline{\hat{\beta}} \underline{\hat{\gamma}}^T \quad (4.1.2.10)$$

$$\text{met } \underline{\hat{\lambda}}_0 = \sqrt{\mu_{\max}}, \quad \underline{\hat{\beta}} = \frac{p}{||p||} \quad \text{en} \quad \underline{\hat{\gamma}} = \frac{q}{||q||}$$

Uit (4.1.2.7) blijkt dat $\underline{\hat{\beta}}$, $\underline{\hat{\gamma}}$ en $\underline{\hat{\lambda}}_0$ moeten voldoen aan

$$\underline{\hat{\beta}} = \frac{1}{\underline{\hat{\lambda}}_0} \underline{C} \underline{\hat{\gamma}}, \quad ||\underline{\hat{\beta}}|| = 1$$

en (4.1.2.11)

$$\underline{\hat{\gamma}} = \frac{1}{\underline{\hat{\lambda}}_0} \underline{C}^T \underline{\hat{\beta}}, \quad ||\underline{\hat{\gamma}}|| = 1$$

De vectoren $\underline{\hat{\beta}}$ en $\underline{\hat{\gamma}}$ en de skalar $\underline{\hat{\lambda}}_0$ kunnen met behulp van de volgende procedure bepaald worden:

Kies een willekeurige n -vektor $y^{(0)}$ en voer het volgende iteratieproces uit:

$$\underline{x}^{(k)} = \underline{C} \underline{y}^{(k)} \quad (4.1.2.12^a)$$

en

$$\underline{y}^{(k+1)} = \underline{C}^T \underline{x}^{(k)} \quad (4.1.2.12^b)$$

Herhaalde substitutie van (4.1.2.12^a) in (4.1.2.12^b) en omgekeerd levert voor $k = N$

$$\underline{y}^{(N)} = (\underline{C}^T \underline{C})^N y^{(0)} \quad (4.1.2.13)$$

Omdat $\underline{C}^T \underline{C}$ een $n \times n$ -hermitische matrix is, heeft $\underline{C}^T \underline{C}$ n orthogonale eigenvectoren $\underline{\xi}_1 \dots \underline{\xi}_n$, zodat $y^{(0)}$ te schrijven is als

$$y^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \underline{\xi}_i \quad (4.1.2.14)$$

Kombinatie van (4.1.2.13) en (4.1.2.14) resulteert in

$$\underline{y}^{(N)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mu_i^N \underline{\xi}_i = \mu_{\max}^N \sum_{i=1}^n \alpha_i (\mu_i / \mu_{\max})^N \underline{\xi}_i \quad (4.1.2.15)$$

met μ_i de bij $\underline{\xi}_i$ behorende eigenwaarde van $\underline{C}^T \underline{C}$. Omdat van een hermitische matrix alle eigenwaarden ≥ 0 zijn, geldt $0 \leq (\mu_i / \mu_{\max}) \leq 1$, zodat voor voldoende groot aantal iteraties N volgt

$$\underline{y}^{(N)} = \mu_{\max}^N \alpha_{\max} \underline{\xi}_{\max} \quad (4.1.2.16)$$

met $\underline{\xi}_{\max}$ de bij $\mu_{\max}$ behorende eigen-vektor en $\alpha_{\max}$ de bij $\underline{\xi}_{\max}$ behorende coëfficiënt. Daar

$$\underline{y}^{(N+1)} = \mu_{\max}^{(N+1)} \alpha_{\max} \underline{\xi}_{\max}$$

geldt

$$\mu_{\max} = \hat{\lambda}_0^2 = \frac{||\underline{y}^{(N+1)}||}{||\underline{y}^{(N)}||} \quad (4.1.2.17)$$

Omdat $\hat{\underline{y}}$ de bij $\mu_{\max}$ behorende genormeerde eigen-vektor van $\underline{C}^T \underline{C}$ is, volgt uit (4.1.2.16)

$$\hat{\underline{y}} = \frac{\underline{y}^{(N)}}{||\underline{y}^{(N)}||} \quad (4.1.2.18)$$

Vergelijking van (4.1.2.11) en (4.1.2.12) laat zien dat $\hat{\underline{\beta}}$ verkregen kan worden via

$$\hat{\underline{\beta}} = \frac{\underline{x}^{(N)}}{||\underline{x}^{(N)}||} \quad (4.1.2.19)$$

Op grond van het voorgaande zal duidelijk zijn, dat naarmate $\mu_{\max}$ groter is t.o.v. de overige eigenwaarden van $\underline{C} \underline{C}^T$ de benadering van $\underline{C}$ door $\hat{\underline{C}}$ beter is. Een maat hiervoor wordt dan ook gegeven door

$$M = \frac{\mu_{\max}}{\sum_{i=1}^n \mu_i}$$

Daar

$$\text{tr}\{\underline{C} \underline{C}^T\} = \sum_{i=1}^n \mu_i$$

is dit gelijk aan

$$M = \frac{\hat{\lambda}_0^2}{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{ij}^2}$$

Bij een exakte fitting van het model aan de waarnemingen is $M = 1$. Voor meer informatie over dit soort benaderingstechnieken voor matrices wordt verwezen naar het artikel van Good (11).

Aangezien $\hat{\lambda}_0$, $\hat{\beta}$ en $\hat{\gamma}$ berekend worden op basis van de stochastische matrix $\underline{C}$ zullen deze schatters eveneens een stochastisch karakter hebben, waardoor ze behept zullen zijn met een zekere variabiliteit.

Om uitspraken te kunnen doen over de juistheid en betrouwbaarheid van het gekozen model, zal deze variabiliteit bekend moeten zijn. Uit het bovenstaande blijkt dat hiertoe de kansverdelingen van de eigenwaarden en eigenvektoren van stochastische matrices ($\underline{C} \underline{C}^T$ en $\underline{C}^T \underline{C}$) bepaald moeten worden. Dit is echter een zeer complex probleem, dat in het kader van dit onderzoek niet opgelost kan worden. Daarom zijn slechts de volgende voorwaardelijke variantieberekeningen uitgevoerd.

In plaats van (4.1.2.3) is te schrijven

$$c_{ij} = \lambda_0 \beta_i \gamma_j + \varepsilon_{ij} \quad ; \quad \sum_{i=1}^m \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_{j=1}^n \gamma_j^2 = 1 \quad (4.1.2.20)$$

Indien nu aangenomen wordt dat λ_0 en β_i , $i = 1 \dots m$, bekend zijn (zodat $\hat{\lambda}_0 = \lambda_0$, $\hat{\beta}_i = \beta_i$, $i = 1 \dots m$), dan is (4.1.2.20) voor een vaste j op te vatten als een lineaire regressievergelijking met één onbekende parameter γ_j .

Deze γ_j kan dan geschat worden door

$$\hat{\gamma}_j | \hat{\lambda}_0, \hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^m c_{ij} \lambda_0 \beta_i}{\sum_{i=1}^m (\lambda_0 \beta_i)^2} = \frac{1}{\lambda_0} \sum_{i=1}^m c_{ij} \beta_i \quad (4.1.2.21)$$

wat overeenkomt met (4.1.2.11).

Voor deze schatter geldt

$$\begin{aligned} E \{ \hat{\gamma}_j | \hat{\lambda}_0, \hat{\beta} \} &= \frac{1}{\lambda_0} \sum_{i=1}^m E \{ \underline{c}_{ij} | \hat{\lambda}_0 = \lambda_0, \hat{\beta}_i, i=1 \dots m \} \beta_i \\ &= \frac{1}{\lambda_0} \sum_{i=1}^m \lambda_0 \beta_i^2 \gamma_j = \gamma_j \end{aligned}$$

en

$$\begin{aligned} \text{var} \{ \hat{\gamma}_j | \hat{\lambda}_0, \hat{\beta} \} &= \frac{1}{\lambda_0^2} \sum_{i=1}^m \text{var} \{ \underline{c}_{ij} | \hat{\lambda}_0 = \lambda_0, \hat{\beta}_i = \beta_i, i=1 \dots m \} \beta_i^2 \\ &= \frac{1}{\lambda_0^2} \sum_{i=1}^m \sigma_j^2 \beta_i^2 = \frac{\sigma_j^2}{\lambda_0^2} \end{aligned} \quad (4.1.2.22)$$

waarbij gebruik is gemaakt van de onderlinge onafhankelijkheid van de $\underline{c}_{ij}$ en verondersteld is dat $\sigma_{ij}^2 = \sigma_j^2$, $i=1 \dots m$.

Omdat σ_j^2 onbekend is, wordt deze geschat door

$$s_j^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\underline{c}_{ij} - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2$$

Evenzo kan worden aangetoond dat de voorwaardelijke schatter voor β_i gegeven wordt door

$$\hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma} = \frac{1}{\lambda_0} \sum_{j=1}^n \underline{c}_{ij} \gamma_j$$

overeenkomend met (4.1.2.11).

Hiervoor geldt

$$\begin{aligned} E \{ \hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma} \} &= \beta_i \\ \text{var} \{ \hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma} \} &= \frac{\sigma_i^2}{\lambda_0^2} \end{aligned} \quad (4.1.2.23)$$

aannemende dat $\sigma_{ij}^2 = \sigma_i^2$, $j = 1 \dots n$.

De variantie σ_i^2 kan geschat worden door

$$s_i^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (\underline{c}_{ij} - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2$$

Samenvattend geldt dus

$$\begin{cases} s^2 \{\hat{\gamma}_j | \hat{\lambda}_0, \hat{\beta} = \frac{1}{(m-1)\hat{\lambda}_0^2} \sum_{i=1}^m (c_{ij} - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \\ s^2 \{\hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma} = \frac{1}{(n-1)\hat{\lambda}_0^2} \sum_{j=1}^n (c_{ij} - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \end{cases} \quad (4.1.2.24)$$

Er zij met nadruk op gewezen, dat deze voorwaardelijke varianties (veel) kleiner zullen zijn dan de totale variantie in de schatters, aangezien door het conditioneren van enkele variabelen een stuk variantie als het ware wordt weggenomen.

4.1.3 Problemen bij de toepassing

Het komt herhaaldelijk voor dat er in de bemonsteringsmatrix $\underline{C}$ gegevens ontbreken. Dit kan zijn omdat er op de desbetreffende dag en plaats geen monster is genomen, of omdat het gegeven niet of onjuist in het databestand is terecht gekomen.

Indien een gegeven, om welke reden dan ook, ontbrak in de datamatrix, is daarvoor het getal 0 (nul) geschreven.

Bij de uitvoering van de twee beschreven methoden kunnen daardoor echter moeilijkheden ontstaan, die tot een onjuiste schatting van λ_0 , β_i en γ_j leiden. Deze nullen kunnen namelijk een ontoelaatbare invloed op de te minimaliseren kwadratensom S uitoefenen. Dit kan voorkomen worden door in deze som alleen die kwadraten mee te laten tellen, waarvan $c_{ij} \neq 0$. Hiertoe is een matrix P gedefinieerd met elementen p_{ij} , waarvan geldt

$$p_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{als } c_{ij} \neq 0 \\ 0 & \text{als } c_{ij} = 0 \end{cases}$$

In plaats van S , gedefinieerd door (4.1.2.5) moet nu geminimaliseerd worden

$$S' = ||\underline{C} - \hat{\underline{C}}'||_E^2 \quad (4.1.3.1)$$

met $\hat{\underline{C}}'$ de matrix met elementen

$$\hat{c}_{ij} = \hat{v}_i p_{ij} \hat{w}_j \quad i = 1 \dots m, j = 1 \dots n \quad (4.1.3.2)$$

Noodzakelijke voorwaarden van het minimaliseren van S' worden weergegeven door

$$\begin{cases} \frac{\partial S'}{\partial \hat{v}_i} = 0 & i = 1 \dots m \\ \frac{\partial S'}{\partial \hat{w}_j} = 0 & j = 1 \dots n \end{cases} \quad (4.1.3.3)$$

Hieraan is voldaan als

$$\begin{cases} \hat{v}_i = \frac{\sum_{j=1}^n c_{ij} p_{ij} \hat{w}_j}{\sum_{j=1}^n p_{ij} \hat{w}_j^2} \\ \hat{w}_j = \frac{\sum_{i=1}^m c_{ij} p_{ij} \hat{v}_i}{\sum_{i=1}^m p_{ij} \hat{v}_i^2} \end{cases} \quad (4.1.3.4)$$

Ook nu is het weer gewenst over te gaan op de genormeerde vektoren $\hat{\beta}$ en $\hat{\gamma}$. Zij

$$\hat{\lambda}_0 = ||\hat{v}|| \cdot ||\hat{w}|| \quad (4.1.3.5)$$

dan volgt uit (4.1.3.4) dat

$$\begin{cases} \hat{\beta}_i = \frac{\hat{v}_i}{||\hat{v}||} = \frac{1}{\hat{\lambda}_0} \frac{\sum_{j=1}^n c_{ij} p_{ij} \hat{\gamma}_j}{\sum_{j=1}^n p_{ij} \hat{\gamma}_j^2} \\ \hat{\gamma}_j = \frac{\hat{w}_j}{||\hat{w}||} = \frac{1}{\hat{\lambda}_0} \frac{\sum_{i=1}^m c_{ij} p_{ij} \hat{\beta}_i}{\sum_{i=1}^m p_{ij} \hat{\beta}_i^2} \end{cases} \quad (4.1.3.6)$$

Uitgaande van een startvektor γ^0 kan dit stelsel vergelijkingen iteratief worden opgelost^{x)}. Rekonstruktie van de concentratie c_{ij} is dan mogelijk volgens

^{x)} Er zal nog onderzocht moeten worden of hiermee altijd het absolute minimum van S' bereikt wordt, aangezien de in par. 4.1.2 geschetste bewijsvoering hier niet meer van toepassing is.

$$\hat{c}_{ij} = p_{ij} \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j \quad (4.1.3.7)$$

Ter illustratie zijn in figuur 4.1 de gerekonstrueerde en de gemeten orthofosfaatconcentraties in het Hollands Diep getekend.

Bij ontbrekende waarnemingen blijven de uitdrukkingen (4.1.2.22) en (4.1.2.23) van de voorwaardelijke varianties in resp. $\hat{\gamma}_j$ en $\hat{\beta}_i$ geldig. Alleen de schattingen van σ_j^2 en σ_i^2 zullen aangepast moeten worden, en wel zodanig dat

$$\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^m p_{ij}\right) - 1} \sum_{i=1}^m p_{ij} (c_{ij} - p_{ij} \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \quad (4.1.3.8)$$

en

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{\left(\sum_{j=1}^n p_{ij}\right) - 1} \sum_{j=1}^n p_{ij} (c_{ij} - p_{ij} \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \quad (4.1.3.9)$$

4.1.4 Presentatie resultaten algemene model

Bij de hierboven gegeven beschrijving van de schattingsprocedure is door middel van onderstreping aangegeven dat de schatters $\hat{\lambda}_0$, $\hat{\beta}_i$ en $\hat{\gamma}_j$ stochastische variabelen zijn. In de paragrafen waarin de schattingsresultaten behandeld worden, zal deze onderstreping weggelaten worden, aangezien een schattingsresultaat opgevat dient te worden als een specifieke realisatie van een stochastische variabele.

De resultaten die met behulp van het algemene model worden verkregen, kunnen op diverse manieren worden gepresenteerd.

Er is bij het algemene model gekozen voor de volgende presentatie:

De resultaten $\hat{\beta}_i$ (èn $\hat{\lambda}_0 \hat{\gamma} \hat{\beta}_i$) resp. $\hat{\gamma}_j$ (èn $\hat{\lambda}_0 \hat{\beta} \hat{\gamma}_j$) worden grafisch weergegeven als functie van plaats resp. tijd.

Zoals beschreven is geeft de vektor $\hat{\beta}$ het genormeerde geschatte verloop van de concentratie in het onderzoeksgebied weer en $\hat{\gamma}$ het genormeerd geschatte verloop van de concentratie op een referentiestation over een bepaalde periode.

Omdat het belangrijk is om te weten of (en in welke mate) $\hat{\beta}$ tijdsafhankelijk is, wordt ook $\hat{\beta}_i$, bepaald uit een geselecteerd gedeelte van de bemonsteringsgegevens, als functie van de plaats weergegeven.

De schatting van de concentratie door $\hat{\lambda}_o \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j$ wordt uiteraard vergeleken met de gemeten concentratie c_{ij} . Daartoe wordt het relatieve verschil

$$\left(\frac{c_{ij} - \hat{\lambda}_o \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j}{c_{ij}} \right) \cdot 100\%$$

grafisch weergegeven.

4.2 Het uitgebreide model

4.2.1 Inleiding

De verwachting is, uitgaande van het verloop van de concentraties totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof, dat er aanzienlijke sedimentatie is in het onderzoekgebied. De veronderstelling is nu dat deze sedimentatie kan worden opgevat als een 1^e orde proces, waarin k een sedimentatiekonstante is.

In hoofdstuk 3 zijn de consequenties van deze veronderstelling voor het concentratieverloop nader uitgewerkt met verschillende veronderstellingen betreffende de stromingssituatie in het onderzoekgebied.

De uitbreiding van het model houdt in dat nu wordt verondersteld dat voor het verloop van de concentratie in zijn algemeenheid kan worden geschreven

$$c(x,t) = c(o,t) e^{f(x)g(t)} \quad (4.2.1.1)$$

Gelet op het theoretische concentratieverloop dat in hoofdstuk 3 werd afgeleid, is de uitbreiding van het algemene model interessant als de situatie in het Hollands Diep/Haringvliet als quasi-stationair kan worden opgevat en aanwezige processen (of lozingen) volgens een eerste orde reactie verlopen.

In hoofdstuk 3 is afgeleid dat het verloop van de concentratie in een dergelijke toestand kan worden beschreven door

$$c(x,t) = c(o,t) e^{-\frac{1}{u(t)} \int_0^x \frac{k(\chi)}{u(\chi)} d\chi} \quad (4.2.1.2)$$

waarbij is verondersteld dat voor de stroomsnelheid geldt

$$u(x,t) = u(x) \cdot u(t) \quad (4.2.1.3)$$

waarin $u(t)$ de stroomsnelheid op een referentiestation is. Gezien figuur 2.2 lijkt deze aanname aanvaardbaar voor een afvoer bij Lobith kleiner dan $1700 \text{ m}^3/\text{s}$. Toepassing van het uitgebreide model (4.2.1.1) op het concentratieverloop volgens (4.2.1.2) zal als informatie opleveren:

$$f(x) + \int_0^x \frac{k(\chi)}{u(\chi)} d\chi \quad (4.2.1.4)$$

$$g(t) + \frac{1}{u(t)} \quad (4.2.1.5)$$

Uit het verloop van $f(x)$ kan informatie worden verkregen over de in het beschouwde gebied aanwezige processen, terwijl $g(t)$ informatie geeft over het verloop van de stroomsnelheid (in een quasi-stationaire toestand).

4.2.2 Schattingsprocedure van het uitgebreide model

Uitgaande van het model (4.2.1.1) wordt voor een meting op de plaats x_i ten tijde t_j verwacht

$$c(x_i, t_j) = c_{ij} = c(0, t_j) e^{f(x_i) g(t_j)} \quad i=1 \dots m, j=1 \dots n \quad (4.2.2.1)$$

Voor de logaritmie $y_{ij} = \ln(c_{ij})$ geldt dan

$$y_{ij} = \alpha_j + v_i w_j \quad i = 1 \dots m, j = 1 \dots n \quad (4.2.2.2)$$

met

$$\alpha_j = \ln c(0, t_j)$$

$$v_i = f(x_i)$$

$$w_j = g(t_j)$$

Ten gevolge van meetfouten en/of andere storingsbronnen zal worden waargenomen

$$\underline{y}_{ij} = \alpha_j + v_i w_j + \underline{\varepsilon}_{ij} \quad i = 1 \dots m, j = 1 \dots n \quad (4.2.2.3)$$

Verondersteld wordt, dat de $\underline{\varepsilon}_{ij}$ normaal verdeelde onderling onafhankelijke stochastische variabelen zijn met gemiddelde nul en variantie σ_{ij}^2 .

(N.B. Aangenomen wordt dus dat in plaats van c_{ij} zelf nu $\ln(c_{ij})$ normaal verdeeld is!) Op basis van de waarnemingen $\underline{y}_{ij}$ moeten schatters $\hat{\alpha}_j$, $\hat{v}_i$ en $\hat{w}_j$ voor resp. α_j , v_i en w_j bepaald worden zodanig dat

$$\underline{S} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (\underline{y}_{ij} - \hat{\alpha}_j - \hat{v}_i \hat{w}_j)^2 \quad (4.2.2.4)$$

minimaal is.

Een noodzakelijke voorwaarde hiervoor wordt gegeven door

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial S}{\partial \alpha_j} = 0 & j = 1 \dots n \\ \frac{\partial S}{\partial w_j} = 0 & j = 1 \dots n \\ \frac{\partial S}{\partial v_i} = 0 & i = 1 \dots m \end{array} \right. \quad (4.2.2.5)$$

waaraan voldaan is indien

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{\alpha}_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\underline{y}_{ij} - \hat{v}_i \hat{w}_j) & j = 1 \dots n \\ \hat{w}_j = \frac{\sum_{i=1}^m (\underline{y}_{ij} - \hat{\alpha}_j) \hat{v}_i}{\sum_{i=1}^m \hat{v}_i^2} & j = 1 \dots n \\ \hat{v}_i = \frac{\sum_{j=1}^n (\underline{y}_{ij} - \hat{\alpha}_j) \hat{w}_j}{\sum_{j=1}^n \hat{w}_j^2} & i = 1 \dots m \end{array} \right. \quad (4.2.2.6)$$

Dit stelsel vergelijkingen is alleen numeriek op te lossen, indien een tweetal aanvullende eisen worden gesteld, waaraan de oplossing moet voldoen.

Allereerst wordt geeist dat

$$\sum_{i=1}^m \hat{v}_i = 0 \quad (4.2.2.7)$$

waaruit volgt dat

$$\hat{\alpha}_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \underline{y}_{ij} \quad (4.2.2.8)$$

zodat $\hat{\alpha}_j$ onafhankelijk van $\hat{v}$ en $\hat{w}$ te berekenen is.

Stel vervolgens

$$\underline{z}_{ij} = \underline{y}_{ij} - \hat{\alpha}_j \quad (4.2.2.9)$$

Dan volgt uit (4.2.2.6)

$$\begin{aligned}\underline{\hat{w}} &= \frac{\underline{Z}^T \underline{\hat{v}}}{||\underline{\hat{v}}||^2} \\ \underline{\hat{v}} &= \frac{\underline{Z} \underline{\hat{w}}}{||\underline{\hat{w}}||^2}\end{aligned}\tag{4.2.2.10}$$

met $\underline{Z}$ de $m \times n$ -matrix met elementen z_{ij} , $\underline{\hat{v}}$ de m -vektor $(\hat{v}_1 \dots \hat{v}_m)^T$ en $\underline{\hat{w}}$ de n -vektor $(\hat{w}_1 \dots \hat{w}_n)$.

Analoog het in paragraaf 4.1.2 behandelde verloopt de schattingsprocedure voor $\underline{\hat{v}}$ en $\underline{\hat{w}}$ dan in principe als volgt:

- 1) bepaald de maximale eigenwaarde $\underline{v}_{\max}$ van $\underline{Z} \underline{Z}^T$;
 - 2) bepaal de bij $\underline{v}_{\max}$ behorende eigenvectoren $\underline{p}$ en $\underline{q}$ van resp. $\underline{Z} \underline{Z}^T$ en $\underline{Z}^T \underline{Z}$, en
 - 3) kies $\underline{\hat{v}} = \delta_3 \underline{p}$ en $\underline{\hat{w}} = \delta_4 \underline{q}$, zodanig dat $||\underline{\hat{v}}||^2 ||\underline{\hat{w}}||^2 = \underline{v}_{\max}$.
- Doordat bij de keuze van δ_3 en δ_4 weer een onbepaaldheid optreedt, worden $\underline{p}$ en $\underline{q}$ genormeerd en wordt $\hat{z}_{ij}$ berekend door

$$\hat{z}_{ij} = \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j \quad i=1 \dots m, j=1 \dots n \tag{4.2.2.11}$$

met

$$\hat{\lambda}_0 = \sqrt{\underline{v}_{\max}}; \hat{\beta} = \frac{\underline{p}}{||\underline{p}||} \quad \text{en} \quad \hat{\gamma} = \frac{\underline{q}}{||\underline{q}||}$$

Samenvattend geldt dus nu:

Voor y_{ij} wordt het model aangenomen

$$y_{ij} = \alpha_j + \lambda_0 \beta_i \gamma_j \quad i = 1 \dots m, j = 1 \dots n$$

met de aanvullende eisen

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^m \beta_i &= 0 \\ \sum_{i=1}^m \beta_i^2 &= 1 & \sum_{j=1}^n \gamma_j^2 &= 1\end{aligned}$$

Voor de schatters $\hat{\alpha}_j$, $\hat{\lambda}_0$, $\hat{\beta}_i$ en $\hat{\gamma}_j$ geldt dan

$$\hat{\alpha}_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_{ij}$$

$$\hat{\lambda}_0 = \sqrt{\lambda_{\max}}$$

met $\lambda_{\max}$ de maximale eigenwaarde van $\underline{Z} \underline{Z}^T$

$\hat{\beta}_i$ = de i^e komponent van de bij $\lambda_{\max}$ behorende genormeerde eigenvektor van $\underline{Z} \underline{Z}^T$, zodat

$$\sum_{i=1}^m \hat{\beta}_i = 0 \quad \text{en} \quad \sum_{i=1}^m \hat{\beta}_i^2 = 1$$

$\hat{\gamma}_j$ = de j^e komponent van de bij $\lambda_{\max}$ behorende genormeerde eigenvektor van $\underline{Z}^T \underline{Z}$, zodat

$$\sum_{j=1}^n \hat{\gamma}_j^2 = 1$$

De konstruktie van de konzentratie is nu mogelijk volgens

$$\hat{c}_{ij} = e^{\hat{\alpha}_j} e^{\hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j}$$

Ter illustratie zijn in figuur 4.2 de gerekonstrueerde en de gemeten totaal-fosfaatkonzentraties in het Hollands Diep/Haringvliet getekend.

Evenmin als in paragraaf 4.1.2 is het hier mogelijk de betrouwbaarheden van de gevonden schatters te berekenen. Er wordt dan ook weer volstaan met de berekening van enkele voorwaardelijke varianties.

Voor vaste j is de vergelijking

$$y_{ij} = \alpha_j + \lambda_0 \beta_i \gamma_j + \varepsilon_{ij} \quad (4.2.2.12)$$

bij bekend veronderstelde λ_0 , is β_i , $i = 1 \dots m$, op te vatten als een lineaire regressievergelijking met onbekende parameters α_j en γ_j . Aangezien

$\sum_{i=1}^m \beta_i = 0$ worden de schatters voor deze parameters gegeven door

$$\underline{\alpha}_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_{ij}$$

en

$$\hat{\underline{Y}} | \hat{\underline{\lambda}}_0, \hat{\underline{\beta}} = \frac{\sum_{i=1}^m y_{ij} \lambda_0 \beta_i}{\sum_{i=1}^m (\lambda_0 \beta_i)^2} = \frac{1}{\lambda_0} \sum_{i=1}^m z_{ij} \beta_i$$

overeenkomstig (4.2.2.9) en (4.2.2.10).

Voor deze schatters geldt

$$\begin{aligned} E \{ \underline{\alpha}_j \} &= \alpha_j \\ \text{var} \{ \underline{\alpha}_j \} &= \frac{\sigma_j^2}{m} \end{aligned} \quad (4.2.2.13)$$

$$\begin{aligned} E \{ \hat{\underline{Y}}_j | \hat{\underline{\lambda}}_0, \hat{\underline{\beta}} \} &= \gamma_j \\ \text{var} \{ \hat{\underline{Y}}_j | \hat{\underline{\lambda}}_0, \hat{\underline{\beta}} \} &= \frac{\sigma_j^2}{\lambda_0^2} \end{aligned} \quad (4.2.2.14)$$

waarbij verondersteld is dat $\sigma_{ij}^2 = \sigma_j^2$, $i = 1, \dots, m$.
Aangezien σ_j^2 onbekend is, wordt deze geschat door

$$s_j^2 = \frac{1}{m-2} \sum_{i=1}^m (y_{ij} - \underline{\alpha}_j - \underline{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\underline{Y}}_j)^2$$

Voor vaste i is vergelijking (4.2.2.12) bij bekend veronderstelde λ_0 , γ_j , $j = 1, \dots, n$ en α_j , $j = 1, \dots, n$ te beschouwen als een lineaire regressievergelijking met één onbekende parameter β_i . Deze wordt dan geschat volgens

$$\begin{aligned} \hat{\underline{\beta}} | \hat{\underline{\lambda}}_0, \hat{\underline{Y}}, \hat{\underline{\alpha}} &= \\ &= \frac{\sum_{j=1}^n (y_{ij} - \alpha_j) \lambda_0 \gamma_j}{\sum_{j=1}^n (\lambda_0 \gamma_j)^2} = \frac{1}{\lambda_0} \sum_{j=1}^n z_{ij} \gamma_j \end{aligned}$$

overeenkomstig (4.2.2.10).

Hiervoor geldt

$$E \{ \hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma}, \hat{\alpha} \} = \beta_i$$

$$\text{var} \{ \hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma}, \hat{\alpha} \} = \frac{\sigma_i^2}{\lambda_0^2} \quad (4.2.2.15)$$

waarbij verondersteld is dat $\sigma_{ij}^2 = \sigma_i^2$, $j=1 \dots n$.

De variantie σ_i^2 wordt geschat door

$$\underline{s}_i^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \hat{\alpha}_j - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2$$

Samenvattend geldt dus

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{s}^2 \{ \hat{\alpha}_j \} = \frac{1}{m(m-2)} \sum_{i=1}^m (y_{ij} - \hat{\alpha}_j - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \\ \underline{s}^2 \{ \hat{\gamma}_j | \hat{\lambda}_0, \hat{\beta} \} = \frac{1}{\hat{\lambda}_0^2 (m-2)} \sum_{i=1}^m (y_{ij} - \hat{\alpha}_j - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \\ \underline{s}^2 \{ \hat{\beta}_i | \hat{\lambda}_0, \hat{\gamma}, \hat{\alpha} \} = \frac{1}{\hat{\lambda}_0^2 (n-1)} \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \hat{\alpha}_j - \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j)^2 \end{array} \right. \quad (4.2.2.16)$$

Ook hier moet weer rekening gehouden worden met het feit dat de totale variantie in de berekende schatters groter zal zijn dan de hierboven gegeven voorwaardelijke varianties.

4.2.3 Problemen bij de toepassing

Evenals bij de toepassing van het algemene model zal bij de toepassing van het uitgebreide model rekening gehouden moeten worden met ontbrekende waarnemingen.

Zij weer de matrix P gedefinieerd, met elementen

$$p_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{als } c_{ij} \neq 0 \\ 0 & \text{als } c_{ij} = 0 \end{cases}$$

Geminimaliseerd moet nu worden

$$\underline{S}' = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (\underline{y}_{ij} - p_{ij} \hat{\alpha}_j - p_{ij} \hat{v}_i \hat{w}_j)^2 \quad (4.2.3.1)$$

Uitwerken van de noodzakelijke voorwaarden

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S'}{\partial \hat{\alpha}_j} = 0 \quad j = 1 \dots n \\ \frac{\partial S'}{\partial \hat{v}_i} = 0 \quad i = 1 \dots m \\ \frac{\partial S'}{\partial \hat{w}_j} = 0 \quad j = 1 \dots n \end{array} \right. \quad (4.2.3.2)$$

geeft nu

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\alpha}_j = \frac{\sum_{i=1}^m p_{ij} (\underline{y}_{ij} - \hat{v}_i \hat{w}_j)}{\sum_{i=1}^m p_{ij}} \\ \hat{w}_j = \frac{\sum_{i=1}^m (\underline{y}_{ij} - \hat{\alpha}_j) p_{ij} \hat{v}_i}{\sum_{i=1}^m p_{ij} \hat{v}_i^2} \\ \hat{v}_i = \frac{\sum_{j=1}^n (\underline{y}_{ij} - \hat{\alpha}_j) p_{ij} \hat{w}_j}{\sum_{j=1}^n p_{ij} \hat{w}_j^2} \end{array} \right. \quad (4.2.3.3)$$

Om nu de $\hat{\alpha}_j$ onafhankelijk van de $\hat{v}_i$ en $\hat{w}_j$ te kunnen berekenen, zal geeist moeten worden

$$\sum_{i=1}^m p_{ij} \hat{v}_i \hat{w}_j = 0 \quad \text{voor alle } j$$

Dit is in het algemeen niet mogelijk, tenzij δf

$$\hat{w}_j = 0 \quad \text{voor alle } j$$

of

$$\hat{v}_i = 0 \quad \text{voor alle } i.$$

Bij ontbrekende waarnemingen is de in de vorige paragraaf beschreven minimalisatieprocedure dan ook niet toepasbaar. Welke procedure wel geschikt is, vergt nog nadere studie.

4.2.4 Presentatie resultaten van het uitgebreide model

De presentatie van de resultaten van het model

$$y_{ij} = \log c_{ij} = \alpha_j + \lambda_0 \beta_i \gamma_j$$

is t.o.v. het algemene model uitgebreid met een grafische weergave van de functie $\exp(\hat{\alpha}_j)$. Nu geeft $\exp(\hat{\alpha}_j)$ het verloop van de concentratie op een referentiestation weer, $\hat{\beta}_i$ de plaatsafhankelijkheid en $\hat{\gamma}_j$ is (in het geval van sedimentatie volgens een 1^e orde proces in een stationaire of quasi-stationaire toestand waarbij $u(x,t) = u(x) \cdot u(t)$ geldt) evenredig met de reciproke waarde van de stroomsnelheid op een referentiestation.

4.3 De keuze van het model

Er staan ons nu twee modellen ter beschikking:

Het algemene model:

$$c_{ij} = \lambda_0 \beta_i \gamma_j \quad ; \quad \sum_i^m \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_j^n \gamma_j^2 = 1 \quad (4.3.1)$$

Het uitgebreide model:

$$c_{ij} = e^{\alpha_j} + \lambda_0 \beta_i \gamma_j \quad ; \quad \sum_i^m \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_j^n \gamma_j^2 = 1 \quad ;$$

$$\sum_i^m \beta_i = 0 \quad ; \quad \alpha_j = \frac{1}{m} \sum_i^m \log c_{ij} \quad (4.3.2)$$

Het lijkt nuttig om na te gaan of de informatie, die met behulp van het algemene model uit een gegeven situatie wordt verkregen, ook met het uitgebreide model kan worden verkregen of omgekeerd. Voorts moet worden nagegaan wat er uitgaande van de informatie, verkregen met behulp van genoemde modellen, kan worden geconcludeerd over de situatie in het onderzochte gebied.

Om te zien welke informatie de twee modellen kunnen leveren, worden beide modellen toegepast op drie situaties waarin het concentratieverloop bekend is.

Voor de keuze van deze drie testsituaties is het noodzakelijk eerst de toestand in het Hollands Diep/Haringvliet nog eens nader te bekijken.

Belangrijk is dat in het onderzoekgebied de stroomsnelheid op een bemonsteringsstation tijdsafhankelijk is. Dit betekent dat voor de diverse stoffen slechts een theoretisch concentratieverloop is af te leiden indien de situatie op het tijdstip van bemonstering stationair is. De toestand is dan quasi-stationair of stationair.

Zoals in hoofdstuk 3 is beschreven kan voor een instationaire situatie alleen nog informatie worden verkregen door het bepalen van een gemiddelde concentratie die betrekking zal hebben op een stationaire situatie. De testsituaties kunnen dus overeenkomen met het verwachte concentratieverloop gedurende een stationaire of quasi-stationaire toestand.

Als testsituaties worden nu gekozen:

Situatie 1

concentratieverloop:

$$c(x,t) = f(x) \cdot c(t) \quad (4.3.3)$$

of

$$c_{ij} = \lambda_0 \beta_i \gamma_j \quad \text{met} \quad \sum_i^m \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_j^n \gamma_j^2 = 1$$

Situatie 2

concentratieverloop:

$$c(x,t) = c(0,t) e^{f(x)}$$

$$c_{ij} = e^{\alpha_j + \lambda_0 \beta_i} \quad (4.3.4)$$

met

$$\sum_i^m \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_i^m \beta_i = 0$$

Situatie 3

concentratieverloop:

$$c(x,t) = c(0,t) e^{f(x) \cdot g(t)} \quad (4.3.5)$$

$$\delta f$$

$$c_{ij} = e^{\alpha_j + \lambda_0 \beta_i \gamma_j} \quad \text{met} \quad \sum_i^m \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_i^m \beta_i = 0 \quad ; \quad \sum_j^n \gamma_j^2 = 1$$

Zowel het algemene model als het uitgebreide model wordt nu toegepast op de drie bovenstaande testsituaties.

Slechts de resultaten van de toepassingen worden hier vermeld (tabel 4.1); voor een uitvoerige beschrijving wordt verwezen naar bijlage I.

De resultaten worden hier kort samengevat:

Het algemene model:

- voordelen:
- Geeft informatie over het concentratieverloop in stationaire en voor conservatieve stoffen tevens in quasi-stationaire toestanden;
 - Resultaten geven direkt overzicht van de toestand in het beschouwde gebied; en
 - Relatief gering aantal parameters (m+n).
- nadelen:
- Als de toestand quasi-stationair is, kunnen slechts conservatieve stoffen worden beschouwd; voor niet-conservatieve stoffen is het onduidelijk wat de resultaten in een dergelijke toestand voorstellen; en
 - Aan de hand van de resultaten kan niet worden nagegaan of de toestand als stationair, quasi-stationair of instationair kan worden beschouwd.

Het uitgebreide model:

- voordelen:
- Geeft informatie over het concentratieverloop in stationaire en na veronderstellingen omtrent de stroomsnelheid tevens quasi-stationaire toestanden; en
 - Aan de hand van de resultaten kan worden nagegaan of de toestand als stationair, quasi-stationair of instationair kan worden beschouwd.
- nadelen:
- De resultaten moeten eerst vertaald worden om informatie over de toestand in het beschouwde gebied te kunnen geven;
 - Het model vereist iets meer rekenwerk; en
 - Relatief groot aantal parameters (m+2n).

Uit de samenvatting blijkt dat het uitgebreide model mogelijkheden biedt, om na veronderstellingen omtrent de stroomsnelheid, het concentratieverloop van

niet-conservatieve stoffen in quasi-stationaire toestanden te onderzoeken. Nu wordt de keuze van het model niet alleen bepaald door de mogelijkheden van het model, maar ook door de in het te beschouwen gebied aanwezige (hydrologische) situatie.

Uitgaande van de afvoergegevens bij Lobith en de afvoergegevens die zijn verkregen met behulp van het analoge DELTAR-model, blijkt dat bij Lobith-afvoeren kleiner dan de gemiddelde afvoer ($< 1700 \text{ m}^3/\text{s}$) de verblijftijd in het Noordelijk Deltabekken (en zeker in het zuidelijk deel) zodanig lang wordt dat de toestand op één bemonsteringstijdstip t waarschijnlijk niet meer als stationair of quasi-stationair kan worden gekenmerkt. Slechts bij hoge Lobith-afvoer kan in het gehele Noordelijk Deltabekken een stationaire of quasi-stationaire toestand worden verondersteld (zie ook hoofdstuk 2).

Dit heeft tot gevolg dat de bemonsteringsgegevens afkomstig zijn uit zowel quasi-stationaire als instationaire toestanden (afhankelijk van de afvoer bij Lobith).

Uit een dergelijke situatie kunnen de modellen nog slechts informatie over een gemiddelde toestand in een bepaalde periode geven (hoofdstuk 3.5). Toch wordt er bij toepassing van de modellen aangenomen dat de stromingstoestand minstens quasi-stationair is.

Het is moeilijk om, uitgaande van de resultaten die zijn verkregen na toepassing van de modellen op drie testsituaties, een keuze te maken uit de twee modellen.

Bovendien is de nauwkeurigheid van de geschatte grootheden van groot belang voor deze keuze. Beide modellen worden daarom op de situatie van het Hollands Diep/Haringvliet toegepast. Vergelijking van de resultaten zal moeten uitmaken welk model de meeste voordelen (of de minste nadelen) voor beschouwing van de toestand in het Hollands Diep/Haringvliet heeft.

4.4 Nadere (statistische) analyse van de plaatsfunctie β

Naast een goede kwalitatieve beschrijving van de toestand in het Hollands Diep/Haringvliet is tevens een zo betrouwbaar mogelijke kwantitatieve beschrijving van die toestand belangrijk.

De vraag is namelijk niet alleen of bepaalde processen optreden, maar tevens met welke intensiteit processen plaatsvinden.

Allereerst wordt onderzocht of er een proces binnen een bepaald gebied plaatsvindt, waarbij slechts wordt gelet op de resultaten verkregen met het algemene

model.

Bij totaalfosfaat, orthofosfaat en het zwevende stof gehalte blijkt zowel het verloop van de (over de tijd) gemiddelde concentratie als uit het verloop van de geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$ een afname van de concentratie in westelijke richting. Met behulp van de toets van Kendall of de gelijkwaardige toets van Spearman is het mogelijk te onderzoeken in hoeverre deze geconstateerde afname op toeval berust (lit. 6, 7).

Omdat de toets van Kendall in het algemeen iets lastiger is uit te voeren dan de toets van Spearman, wordt voor de laatste gekozen. Wat houdt de toets van Spearman in?

Met de toets van Spearman kan, uitgaande van een aselekte steekproef van gepaarde waarnemingen, onderzocht worden of er een significante rangkorrelatie bestaat tussen twee grootheden.

In dit geval moet de rangkorrelatie bepaald worden tussen de componenten van de geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$ en de positie x van het bemonsteringsstation. De posities x_i worden door hun rangnummers naar opklimmende grootte van x_i vervangen: $i = 1, \dots, m$.

Hetzelfde wordt nu gedaan voor de componenten $\hat{\beta}_i$ van de geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$, met rangnummers s_i ($i = 1, \dots, m$).

Getoetst wordt nu de nulhypothese H_0 dat x en $\hat{\beta}$ onderling onafhankelijk zijn tegen de alternatieve hypothese H_1 dat er sprake is van positieve of negatieve rangkorrelatie.

Verwerping van H_0 (bij een onbetrouwbaarheidsdrempel α) houdt in dat de verandering van de concentratie binnen het beschouwde gebied niet meer aan het toeval kan worden toegeschreven.

De concentratie verandert in dat gebied dus door een proces.

De toetsingsgrootte bij Spearman is

$$\underline{d}^2 = \sum_{i=1}^m (i - s_i)^2 \quad (4.4.1)$$

Kleine waarden van $\underline{d}^2$ wijzen in de richting van een positieve rangkorrelatie en grote waarden op een negatieve rangkorrelatie. Kritieke waarden $\underline{d}^2$ (exact) zijn vermeld in tabel 5.9. Een andere toetsingsgrootte voor de toets van Spearman die vaak wordt gebruikt is:

$$\underline{r}_s = 1 - \frac{6\underline{d}^2}{m(m^2-1)} \quad (4.4.2)$$

die ook wel Spearman's ρ wordt genoemd.

De uiterste waarden van r_s zijn -1 (negatieve rangkorrelatie) en $+1$ (positieve rangkorrelatie).

Voor grote waarden van m ($m > 16$) kan gebruik worden gemaakt van de stelling dat onder H_0 geldt:

$$\frac{r_s \sqrt{m-2}}{\sqrt{1-r_s^2}} \approx t_{(m-2)} \quad (4.4.3)$$

De kritieke waarden van $t_{(m-2)}$ kunnen in de tabel van een student-t-verdeling worden opgezocht.

In hoofdstuk 5 zal voor alle 4 onderzochte stoffen de nulpunthypothese H_0 worden getoetst met de toets van Spearman bij een nog nader te bepalen betrouwbaarheidsdrempel α .

Met een op bovenstaande wijze uitgevoerde toets van Spearman kan alleen getoetst worden of er een proces is in een bepaald gebied, maar niet wat de intensiteit van de proces is.

Uitgaande van het algemene model, waarbij wordt verondersteld dat de concentratie wordt beschreven door (4.3.1) geldt voor deze intensiteit

$$\frac{1}{c(x,t)} \cdot \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{\beta(x)} \cdot \frac{\partial \beta(x)}{\partial x} \quad (4.4.4)$$

De intensiteit (= de relatieve afname van de concentratie op een bepaald traject) komt dus overeen met de relatieve afname van de plaatsfunctie β op dat traject.

In hoofdstuk 5 wordt de relatieve verandering van $\hat{\beta}$ van iedere stof en periode berekend en vergeleken met de relatieve verandering van de concentratie. Daarbij wordt gebruik gemaakt van de gemeten concentratie c_{ij} en de geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$ op een centraal gelegen punt binnen het beschouwde gebied.

Uitgaande van het uitgebreide model, waarbij wordt verondersteld dat de concentratie wordt beschreven door (4.3.2), geldt voor de intensiteit

$$\frac{1}{c(x,t)} \cdot \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = \lambda_0 \gamma(t) \cdot \frac{\partial \beta(x)}{\partial x} \quad (4.4.5)$$

Vergelijking van de afname van de plaatsfunctie en de relatieve afname van de concentratie is dus alleen mogelijk als $\lambda_0 \gamma(t)$ bekend is.

Dit probleem kan op twee manieren worden aangepakt. Indien $\gamma(t)$ varieert in de tijd, kan een schatting van de intensiteit van een bepaald proces worden verkregen door $\gamma(t)$ in vergelijking (4.4.5) te vervangen door de gemiddelde waarde in de beschouwde periode.

Een andere mogelijkheid is aan te nemen dat een stationaire toestand aanwezig is. In een dergelijke situatie is $\gamma(t)$ voor alle tijdstippen gelijk en $\lambda_0 \gamma(t)$ dus bekend:

$$\hat{\gamma}_j = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad j = 1, \dots, n$$

Voor de relatieve afname van de concentratie geldt dan

$$\frac{\Delta c_{ij}}{c_{ij}} = \frac{\lambda_0}{\sqrt{n}} \cdot \Delta\beta \quad (4.4.6)$$

Hierin wordt met c_{ij} de concentratie bij vaste j als functie van de plaats i aangegeven.

In paragraaf 5.3.5 is de relatieve verandering in de concentratie geschat, uitgaande van de verkregen schatting $\hat{\Delta\beta}$ van $\Delta\beta$.

Om de significantie van de intensiteit te bepalen, moet de significantie van het verschil in twee berekende waarden $\hat{\beta}_i$ aangegeven kunnen worden. Bij het gebruik van een klassieke toets hiervoor, zullen vele veronderstellingen noodzakelijk zijn. Daarom is gezocht naar een hiervoor geschikte verdelingsvrije toets, waarbij minder veronderstellingen noodzakelijk zijn.

Een mogelijke aanpak, die hieronder wordt beschreven, is gebaseerd op de reeds beschreven toets van Spearman.

Beschouw de afname van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ op een traject $x_1 \rightarrow x_m$. Hiervoor geldt $\Delta\hat{\beta} = \hat{\beta}_m - \hat{\beta}_1$.

Een schatting voor de afname van $\hat{\beta}$ per afstandseenheid over het gehele traject is dan

$$p_1 = \frac{\hat{\beta}_m - \hat{\beta}_1}{x_m - x_1} \quad (4.4.7)$$

Nu wordt een zodanige helling p_0 ($p_0 < p_1$) gekozen, dat nog juist een significante positieve rangkorrelatie wordt gevonden tussen $y = \hat{\beta} - p_0 x$ en de positie x (bij een onbetrouwbaarheidsdrempel α).

Met deze p_0 wordt dus een ondergrens gevonden voor de afname van β over een

bepaald traject bij een gegeven waarde van α . De toepassing van deze methode is beschreven in de paragrafen 5.2.5 en 5.3.5.

Bij de bepaling van p_0 wordt er van uitgegaan dat er een lineair verband bestaat tussen $\hat{\beta}$ en de positie x . Onder deze aanname is het tevens mogelijk lineaire regressietheorie toe te passen. Echter, bij het vaststellen van de significantie van de gevonden helling zullen extra aannamen gedaan moeten worden omtrent de verdeling van de $\hat{\beta}_i$'s. Een voordeel is evenwel dat uitvoering van lineaire regressie-analyse eenvoudig is te automatiseren. Vooral als een groot aantal bemonsteringsstations wordt beschouwd, dient het gebruik van regressie-analyse te worden overwogen.

5 Toepassing van het model op enkele waterkwaliteitsparameters

5.1 Algemeen

Zowel het algemene als het uitgebreide model wordt toegepast op de bemonsteringsgegevens van chloride, totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof uit de periode 1972^x + 1973.

Bovendien worden beide modellen toegepast op 1972^x en 1973 afzonderlijk, om na te gaan hoe sterk de plaatsafhankelijkheid van de concentratie (β) afhankelijk is van de periode die wordt beschouwd.

Het aantal beschikbare bemonsteringsgegevens per periode is vermeld in tabel 5.1.

De resultaten van de modellen zijn in de volgende tabellen verzameld en/of grafisch weergegeven in de volgende figuren:

Het algemene model:

geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$	:	tabel 5.2	;	figuren 5.1 t/m 5.16
geschatte tijdfunctie $\hat{\gamma}$	:	tabel 5.3	;	figuren 5.17 t/m 5.20

Het uitgebreide model:

geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$	:	tabel 5.4	;	figuren 5.21 t/m 5.36
geschatte tijdfunctie $\hat{\alpha}$	:	tabel 5.5	;	figuren 5.37 t/m 5.40
geschatte tijdfunctie $\hat{\gamma}$	:	tabel 5.5	;	figuren 5.41 t/m 5.44

De resultaten die na toepassing van de genoemde modellen op enkele waterkwaliteitsparameters zijn verkregen, worden nu per parameter en model bekeken.

5.2 De resultaten van het algemene model voor de diverse stoffen

5.2.1 Chloride

5.2.1.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}$

Het verloop van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ kan informatie geven over het (tijdsonafhankelijke) verloop van de concentratie als functie van de plaats.

Het vergelijken van de geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$ uit verschillende perioden (1972^x, 1973) wordt enigszins bemoeilijkt doordat in 1972^x een ander aantal stations werd bemonsterd dan in 1973: de grootte van de genormeerde $\hat{\beta}$ zal voor deze twee perioden dus verschillend zijn.

Uit de figuren 5.1 t/m 5.4 blijkt dat de geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$ in de periode 1972^x + 1973 konstant is op de Nieuwe Merwede en vervolgens snel daalt nabij de Moerdijkbruggen, ten gevolge van het samenkomen van Nieuwe Merwede en Amer (met een relatief laag chloridegehalte).

Na de Moerdijkbrug neemt $\hat{\beta}$ in westelijke richting toe, waarschijnlijk ten gevolge van het binnendringen van zout water via de Volkerak- en Haringvlietsluizen.

Bij beschouwing van 1972^x en 1973 afzonderlijk, is het belangrijk te weten dat de afvoer in 1972^x gemiddeld lager was dan in 1973. De plaatsfunctie $\hat{\beta}$ voor 1972^x kan daarom worden opgevat als een karakteristiek verloop van de (relatieve) concentratie tijdens een periode van lage afvoer en $\hat{\beta}$ voor 1973 als een karakteristiek verloop bij hoge afvoer.

Om de interpretatie te vereenvoudigen is tevens de met $\hat{\beta}_i$ corresponderende waarde van $\hat{\lambda}_0 \bar{\gamma} \hat{\beta}_i$ met de dimensie van concentratie (mg/l) weergegeven.

Uit figuur 5.3 en 5.4 valt op te maken dat $\hat{\beta}$ in beide perioden op het traject Gorkum-Moerdijk konstant is, gevolgd door een snelle daling nabij Moerdijk. De grootte van de afname bij Moerdijk hangt af van het verschil in concentratie in Nieuwe Merwede en Amer. Bij een hoge afvoer bij Lobith en dus lage concentratie in de Nieuwe Merwede, is de daling kleiner dan bij een lage afvoer bij Lobith. In hoofdstuk 5.2.1.2 wordt deze omgekeerde evenredigheid van Q en c nader onderzocht.

Op het traject Moerdijk-Volkeraksluizen neemt $\hat{\beta}$ in zowel 1972^x als 1973 toe.

Ten westen van de Volkeraksluizen verandert $\hat{\beta}$ in 1973 met een relatief hoge gemiddelde afvoer nagenoeg niet, terwijl er in 1972^x met een relatief lage gemiddelde afvoer een toename van $\hat{\beta}$ in westelijke richting aanwezig is.

Als verklaring kan worden aangevoerd dat de bij lage Lobith afvoer

($Q_L < 1700 \text{ m}^3/\text{s}$) bij gesloten Haringvlietsluizen binnendringende hoeveelheid zout water het concentratieverloop in het Haringvliet kan beïnvloeden omdat de afvoer in dat gebied in een dergelijke situatie gering zal zijn en de verblijftijd lang. Bij hoge Lobith-afvoer ($Q_L > 1700 \text{ m}^3/\text{s}$) en geopende Haringvlietsluizen is de invloed van het binnendringende zoute water relatief veel geringer.

In figuur 5.1 zijn de resultaten voor 1972^x + 1973, 1972^x en 1973 in één figuur getekend.

Om de waarden van $\hat{\beta}$ uit 1972^x en 1973 te kunnen vergelijken, moet natuurlijk eerst gekorrigeerd worden voor het feit dat in 1972^x 15 en in 1973 17 stations werden bemonsterd.

Met behulp van $\sum_i^m \hat{\beta}_i^2 = 1$ kan geschat worden dat de gemiddelde waarde van $\hat{\beta}$ in 1972^x een faktor $(17/15)^{1/2} = 1.065$ groter is dan in 1973. Rekening houdend met dit systematische verschil is het relatieve verschil tussen $\hat{\beta}$ in 1972^x en 1973, met uitzondering van de stations H12, H11 (Haringvlietsluizen) en H9 (Volkeraksluizen), kleiner dan 5%.

Een andere methode (met dezelfde resultaten) is het vergelijken van $(\hat{\beta}_i/\bar{\beta})$ voor 1972^x en 1973. De rechter as in figuur 5 geeft de waarde aan van $(\hat{\beta}_i/\bar{\beta})$ voor de verschillende perioden. Uit een beschouwing van meerdere jaren zal duidelijk worden binnen welke grenzen $\hat{\beta}$ zal liggen.

De verwachting is dat de grenzen, waarbinnen $\hat{\beta}$ ligt, weinig verschillen van de grenzen die uit de huidige beschouwing worden verkregen, omdat daarbij zowel naar een jaar met hoge als een jaar met lage afvoer is gekeken.

Uiteraard wordt er bij deze verwachting van uitgegaan dat de chloride-vracht bij Lobith (Rijn) en Lith (Maas) gelijk blijft. Een verhoging van de vracht kan het verloop van $\hat{\beta}$ beïnvloeden.

5.2.1.2 De tijdfunctie $\hat{\gamma}$

Met het algemene model wordt naast een geschatte plaatsfunctie $\hat{\beta}$ ook één geschatte tijdfunctie $\hat{\gamma}$ bepaald, die het verloop van de concentratie als functie van de tijd beschrijft (figuur 5.17). Door een gebrek aan voldoende (getitreerde) chloridegegevens bleek een beschouwing van de korrelatie tussen de concentratie bij Lobith en de tijdfunctie $\hat{\gamma}$ niet mogelijk. Omdat chloride een konservatieve stof is en de chloridevracht bij Lobith in de beschouwde periode geen grote veranderingen ondergaat, werd in plaats daarvan $\hat{\gamma}^{-1}$ (figuur 5.45) vergeleken met de afvoer bij Lobith (figuur 2.3).

De overeenkomst is duidelijk en daarmee wordt tevens de gedachte dat de toestand in de Rijn in hoge mate bepalend is voor de situatie in het Hollands Diep/Haringvliet, onderschreven.

De gelijkvormigheid van $\hat{\gamma}^{-1}$ en de afvoer Q bij Lobith kan met behulp van een korrelatiecoëfficiënt worden gekwantificeerd.

$$r(\hat{\gamma}^{-1}, Q) = \sum_j^n \frac{(\hat{\gamma}_j^{-1} - \overline{\hat{\gamma}^{-1}})}{\left[\sum_j^n (\hat{\gamma}_j^{-1} - \overline{\hat{\gamma}^{-1}})^2 \right]^{1/2}} \cdot \frac{(Q_j - \overline{Q})}{\left[\sum_j^n (Q_j - \overline{Q})^2 \right]^{1/2}} \quad (5.2.2)$$

Welke afvoer Q_j bij Lobith korrespondeert nu met de uit de concentraties afgeleide grootheid $\hat{\gamma}_j^{-1}$?

Aangezien de tijd, die het water nodig heeft om van Lobith naar het Hollands Diep te stromen, onbekend is en afhankelijk van de afvoer bij Lobith, is dit probleem ondervangen door de korrelatiecoëfficiënt te bepalen van $\hat{\gamma}^{-1}$ met de afvoer Q op tien aaneensluitende dagen in de buurt van het bemonsteringstijdstip (7 dagen vóór t/m 2 ná het bemonsteringstijdstip in het Hollands Diep - Haringvliet).

Op deze manier worden dus 10 korrelatiecoëfficiënten berekend, die in figuur 5.46 zijn getekend, als functie van het tijdsverschil in de bepaling van $\hat{\gamma}_j$ voor het onderzoeksgebied en de afvoer Q_j bij Lobith.

Het tijdsverschil Δt is daarbij gedefinieerd als het verschil tussen de bemonsteringstijdstippen van Lobith en het Hollands Diep/Haringvliet.

De korrelatiecoëfficiënt is volgens figuur 5.46 maximaal indien een tijdsverschil van ongeveer 4 dagen wordt aangehouden. Dit komt redelijk overeen met het geschatte werkelijke tijdsverschil.

Belangrijker dan het tijdsverschil is, dat de korrelatiecoëfficiënt groter is dan 0.85 als geldt $2 < \Delta t < 6.5$!

De korrelatiecoëfficiënt blijkt slechts in geringe mate afhankelijk van het exakte tijdstip waarop de bepaling van de afvoer bij Lobith plaatsvindt.

5.2.2 Totaalfosfaat

5.2.2.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}$

De plaatsfunctie $\hat{\beta}$ wordt ook bij totaalfosfaat beschouwd voor de perioden 1972^x + 1973, 1972^x en 1973.

Het verloop van $\hat{\beta}$ is in de drie perioden gelijk, zoals ook blijkt uit figuur 5.5; een sterke afname van het gehalte op de Nieuwe Merwede en het Hollands Diep en een in verhouding minder sterke afname in het Haringvliet.

Opvallend is dat voor alle perioden in de Dordtsche Kil een hogere $\hat{\beta}_1$ -waarde wordt berekend dan op aangrenzende bemonsteringsstations in het Hollands Diep. Ditzelfde verschijnsel doet zich voor bij het zwevend stof (hoofdstuk 5.2.4.1) en wordt waarschijnlijk veroorzaakt door de hogere stroomsnelheden in de Kil. Vergelijking van de resultaten uit de periode 1972^x met die van 1973 levert enige moeilijkheden op omdat in 1972^x vele bemonsteringsgegevens ontbreken. De $\hat{\beta}_1$'s, die uit een dergelijke inkomplete dataset worden bepaald, kunnen daarom een vertekend beeld geven. Bij de beoordeling van de verschillen in $\hat{\beta}_1$ binnen een periode zal hier ook rekening mee moeten worden gehouden. In de figuren 5.1 t/m 5.16 zijn stations met vele ontbrekende data van een sterretje voorzien.

Indien de totaalfosfaatconcentratie verloopt volgens een eerste orde proces (hoofdstuk 3), zal de relatieve afname kleiner zijn naarmate de stroomsnelheid (afvoer) groter is.

Uit de figuren blijkt inderdaad de relatieve afname van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ bij de hoge afvoer in 1973 geringer dan bij de lage afvoer in 1972^x (55% tegen 70%). Deze relatieve afname van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ komt, zoals verwacht, overeen met de relatieve afname van de gemiddelde concentraties, namelijk 53% in 1973 tegen 65% in 1972^x (zie ook figuur 2.8 t/m 2.10).

5.2.2.2 De tijdfunctie $\hat{\gamma}$

De tijdfunctie $\hat{\gamma}$, die met het algemene model wordt berekend, geeft een indruk van het karakteristiek verloop in de tijd van de concentratie in het gehele onderzoekgebied (figuur 5.18).

Het verloop van $\hat{\gamma}$ als functie van de tijd is nogal grillig en het is interessant wat de korrelatie is van $\hat{\gamma}$ met de bij Lobith gemeten concentratie. Helaas is dit door gebrek aan meetgegevens bij Lobith niet mogelijk. In plaats daarvan is de korrelatiecoëfficiënt van de reciproke waarde van $\hat{\gamma}$ met de afvoer bij Lobith bepaald.

De korrelatie bleek gering (korrelatiecoëfficiënt 0.25) hetgeen begrijpelijk is omdat totaalfosfaat niet konservatief is en lozingen wellicht een in de tijd variërend patroon vertonen.

5.2.3 Orthofosfaat

5.2.3.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}$

Bij de beschouwing van de plaatsafhankelijkheid van de orthofosfaatgehalten valt direct de overeenkomst met de plaatsafhankelijkheid van het totaalfosfaat op, zij het dat de totale relatieve afname van $\hat{\beta}$ iets geringer is, het verloop wat vloeiender en $\hat{\beta}$ in de Dordtsche Kil niet relatief hoger in vergelijking met de stations in het Hollands Diep.

Beschouwing van 1972^x en 1973 afzonderlijk toont aan dat de relatieve afname van $\hat{\beta}$ in 1972^x groter is dan in 1973 (59% tegen 45%).

Omdat de afvoer (en waarschijnlijk dus ook de stroomsnelheid) in 1973 groter was dan in 1972^x, komt bovenstaand resultaat overeen met de verwachting, uitgaande van een eerste orde proces. Het resultaat komt ook overeen met de relatieve afname van de gemiddelde concentraties (figuren 2.11 t/m 2.13), die in 1972^x ongeveer 54% is en in 1973 42%.

5.2.3.2 De tijdfunctie $\hat{\gamma}$

De tijdfunctie $\hat{\gamma}$ van orthofosfaat heeft, evenals $\hat{\gamma}$ van totaalfosfaat, een grillig verloop, zij het dat de korrelatie van $\hat{\gamma}^{-1}$ met de afvoer bij Lobith groter is dan bij totaalfosfaat (korrelatiecoëfficiënt 0.55).

Bovendien is er enige overeenkomst in het verloop van $\hat{\gamma}$ voor totaal- en orthofosfaat.

Een relatief hoge korrelatie van $\hat{\gamma}^{-1}$ en afvoer kan verklaard worden uit het feit dat het orthofosfaat in tegenstelling tot totaalfosfaat een opgeloste stof is.

5.2.4 Het zwevende stofgehalte

5.2.4.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}$

De resultaten van het algemene model toegepast op de gegevens van het zwevende stof zijn vrij eenduidig: een zeer sterk afnemend gehalte op het traject Gorkum - Moerdijk en een nagenoeg gelijkblijvend gehalte op het traject Moerdijk - Haringvlietsluizen (figuur 5.13). De verwachting is dat het zwevende stofgehalte gekoppeld is aan de stroomsnelheid.

Uit figuur 5.13 blijkt $\hat{\beta}$ in het onderzoekgebied bij hoge afvoer en dus hoge stroomsnelheid relatief minder af te nemen dan bij lage afvoer. Dit is geheel overeenkomstig het gedrag van de relatieve stroomsnelheid als functie van de afvoer (vergelijk figuur 2.4). Opvallend is dat de concentratie in de Dortsche Kil veel hoger is dan op nabij gelegen stations in het Hollands Diep.

Uit figuur 2.2, waarin de afvoer in Hollands Diep en Kil als functie van de afvoer bij Lobith is getekend, blijkt dat bij Lobith-afvoeren kleiner dan 1700 m³/s de afvoer in Hollands Diep nagenoeg gelijk is aan de afvoer in de Kil. Aangezien de oppervlakte van de dwarsdoorsnede in de Kil veel kleiner is dan de oppervlakte van de dwarsdoorsnede in het Hollands Diep, moet de stroomsnelheid, en daarmee het gehalte zwevende stof, in de Kil aanzienlijk groter zijn dan in het Hollands Diep. Blijkbaar is er hier sprake van resuspensie van bodemslib.

Vergelijking van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ voor 1972^x en 1973 maakt duidelijk dat de relatieve afwijking van $\hat{\beta}$ in de Kil t.o.v. het Hollands Diep in 1972^x groter is dan in 1973, terwijl de gemiddelde afvoer in 1972^x toch kleiner is dan in 1973.

De verklaring van dit verschil wordt duidelijk met figuur 2.2: bij hoge Lobith-afvoer neemt de afvoer in het Hollands Diep snel toe, terwijl de af-

voer in de Kil afneemt. Het verschil in stroomsnelheid van Kil en Hollands Diep neemt dus af bij de toename van de afvoer bij Lobith ($Q_L > 1700 \text{ m}^3/\text{s}$). Tevens valt uit de resultaten af te leiden dat de relatieve afname van $\hat{\beta}$ over het gehele onderzoekgebied in 1972^x iets groter is geweest dan in 1973 (77% tegen 65%). Dit is overeenkomstig de afname van de relatieve stroomsnelheid (figuur 2.4).

5.2.4.2 De tijdfunctie $\hat{\gamma}$

Bij de beschouwing van de tijdfunctie $\hat{\gamma}$ van het gehalte zwevende stof vallen direkt de snelle en grote veranderingen op (figuur 5.20).

Vergelijking van $\hat{\gamma}$ met de afvoer bij Lobith (figuur 2.3) maakt duidelijk dat er slechts een geringe overeenkomst is; alleen het verloop van de afvoer in 1972^x valt enigszins terug te vinden in het zwevende stofgehalte. De uitschieter van $\hat{\gamma}$ en het zwevende stofgehalte in april 1973 kan echter niet met behulp van de Lobith-afvoer verklaard worden.

5.2.5 Nadere (statistische) analyse van de plaatsfunctie β

In hoofdstuk 4.4 is nader ingegaan op twee vormen van de toets van Spearman, waarmee het wellicht mogelijk is uitspraken te doen over de verandering van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ binnen het beschouwde gebied.

Allereerst wordt voor de 4 beschouwde stoffen onderzocht of de plaatsfunctie β een trend bevat, d.w.z. rangkorrelatie tussen de positie x en de plaatsfunctie $\hat{\beta}$. Getoetst wordt de nulhypothese H_0 , dat x en $\hat{\beta}$ onderling onafhankelijk zijn, tegen de alternatieve hypothese H_1 , dat er sprake is van positieve of negatieve rangkorrelatie.

De toetsingsgrootheid $\underline{d}^2$ is gedefinieerd als de som van de kwadraten van de verschillen in rang tussen de positie x en de voor die positie berekende waarde van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$.

De uit de gegevens van 1972^x en 1973 berekende toetsingsgrootheid $\underline{d}^2$ is voor de beschouwde waterkwaliteitsparameter vermeld in tabel 5.8. Deze waarde van $\underline{d}^2$ wordt vervolgens vergeleken met de in tabel 5.7 vermelde linker en rechter kritieke waarden voor deze grootheid. Indien $\underline{d}^2$ kleiner dan de rechter, maar groter dan de linker kritieke waarde is, wordt de nulhypothese - geen rangkorrelatie - aanvaard. Is $\underline{d}^2$ echter groter dan de rechter kritieke waarde of kleiner dan de linker kritieke waarde, dan wordt H_0 verworpen en de alternatieve hypothese - positieve of negatieve rangkorrelatie - aanvaard. Kleine waarden van $\underline{d}^2$ betekenen voor de gekozen rangnummering van de positie x een

afname van $\hat{\beta}$ in westelijke richting; grote waarden van $\underline{d}^2$ houden een afname van $\hat{\beta}$ in oostelijke richting in.

Wordt tweezijdig getoetst met een onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.01$, dan blijkt dat de nulhypothese H_0 - geen rangkorrelatie tussen positie x en de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ - verworpen dient te worden bij totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof (tabel 5.7 en 5.8). De kleine waarden van $\underline{d}^2$ betekenen een afname van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ - en daarmee van de concentratie - in westelijke richting.

Voor chloride wordt H_0 verworpen als de onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.05$ wordt gekozen. Er blijkt in dat geval een geringe negatieve korrelatie te zijn. Het is duidelijk dat een aanwezige korrelatie voor chloride wordt vertroebeld door de lage chloridegehalten nabij Moerdijk. Het gebied kan bij beschouwing van chloride daarom beter in twee kompartimenten worden verdeeld, waarbij de Moerdijkbrug de grens vormt. Wordt nu de toets uitgevoerd voor het meest westelijk gelegen kompartiment (Haringvliet/Hollands Diep) dan is de toetsingsgrootheid $\underline{d}^2$ gelijk aan 430 bij $m = 11$. Volgens tabel 5.7 wordt H_0 zelfs nog verworpen bij $\alpha = 0.01$! Er is daarbij een negatieve korrelatie, hetgeen inhoudt dat de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ (of de chlorideconcentratie) toeneemt in westelijke richting.

Interessanter is om na te gaan binnen welke grenzen deze afname of toename van de plaatsfunctie ligt. Om hierover iets te kunnen zeggen, wordt eerst een schatting van de afname van $\hat{\beta}$ gemaakt. Deze afname wordt zowel absoluut als relatief ten opzichte van de waarde van $\hat{\beta}$ op een centrale positie x_i weergegeven in onderstaande tabel.

stof	H12	H6/H7	BM13/ BM24	afname $\hat{\beta}$ in west. richting	beschouwde trajekt
chloride	.274	.207		-.067 $\equiv$ -28%	(Moerdijk-zee)
totaalfosfaat	.183		.320	.137 $\equiv$ 54%	(Gorkum-zee)
orthofosfaat	.173		.295	.122 $\equiv$ 52%	(" - ")
zwevende stof	.147		.417	.270 $\equiv$ 95%	(" - ")

Indien de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ met behulp van deze geschatte afname van een eventuele trend wordt ontiaan, zullen de overblijvende residuen geen rangkorrelatie (en dus geen verwerping van H_0) met de positie x vertonen. Het is voor een betrouwbare uitspraak over een aanwezige trend in $\hat{\beta}$ dan ook noodzakelijk dat er voor iedere stof een zodanige helling p_0 (= afname per lengte-eenheid)

wordt gekozen, dat er nog juist rangkorrelatie bestaat tussen de positie x_i en $y_i = \hat{\beta}_i - p_0 x_i$. De rangnummers van y_i zijn het gemakkelijkst grafisch te bepalen door in de figuren 5.1 t/m 5.16 lijnen met helling p_0 te trekken en de rangorde van de residuen te bepalen.

Om de bepaling van deze helling p_0 enigszins te vereenvoudigen, wordt gesteld $p_0 = \frac{3}{4} p_1$, waarbij p_1 de totale verandering over het gehele onderzoeksgebied voorstelt.

Bij chloride blijkt er bij een eenzijdige onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0,005$ een toename van $\hat{\beta}$ in westelijke richting van meer dan $\frac{3}{4} p_1$ ($\equiv 20\%$) over het gehele traject Moerdijk - Haringvlietsluizen.

Voor totaalfosfaat is alleen 1973 beschouwd, aangezien deze parameter in 1972 onvoldoende is bemonsterd. Tabel 5.9 geeft voor deze parameter een toetsingsgrootheid $\underline{d}^2 = 66$ bij $m = 12$, hetgeen volgens tabel 5.7 inhoudt dat H_0 zelfs nog dient te worden verworpen indien getoetst wordt met een eenzijdige onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.005$. De afname van $\hat{\beta}$ over het gehele traject is dus méér dan p_0 bij $\alpha = 0.005$ ($p_0 = \frac{3}{4} p_1 \equiv 40\%$).

Voor het orthofosfaat wordt een gelijk resultaat als bij totaalfosfaat gevonden: de afname over het traject Gorkum-zee is méér dan p_0 bij $\alpha = 0.005$ ($p_0 = \frac{3}{4} p_1 \equiv 40\%$).

Bij het zwevende stofgehalte is de Kil buiten beschouwing gelaten. Uit de resultaten vermeld in tabel 5.11 en 5.9 blijkt dan dat voor zwevende stof geen rangkorrelatie meer aanwezig is tussen x_i en $y_i = \hat{\beta}_i - p_0 x_i$ ($p_0 = \frac{3}{4} p_1 \equiv 70\%$).

Wordt het traject in twee stukken verdeeld, waarbij de Moerdijkbrug de scheiding vormt, dan blijkt er op het traject Moerdijk-zee een geringe afname ($p_1 = 0.070$; $p_0 = \frac{1}{2} p_1 \equiv 20\% \rightarrow p > p_0$ bij $\alpha = 0.10$) en op het traject Gorkum-Moerdijk een zeer grote afname ($p_1 = 0.200$; $p_0 = \frac{1}{2} p_1 \equiv 35\% \rightarrow p > p_0$ bij $\alpha = 0.10$) aanwezig.

Samenvattend:

stof	$p_1 \cdot L$	p_1	$p > p_0$	α	traject
chloride	- .067	-28%	$p_0 = \frac{3}{4} p_1 = -20\%$	0.005	Moerdijk-zee
totaalfosfaat	+ .137	54%	$p_0 = \frac{3}{4} p_1 = 40\%$	0.005	Gorkum-zee
orthofosfaat	+ .122	52%	$p_0 = \frac{3}{4} p_1 = 40\%$	0.005	Gorkum-zee
zwevende stof	+ .200	70%	$p_0 = \frac{1}{2} p_1 = 35\%$	0.10	Gorkum-Moerdijk
zwevende stof	+ .070	40%	$p_0 = \frac{1}{2} p_1 = 20\%$	0.10	Moerdijk-zee

Hierin is p_i de absolute verandering van $\hat{\beta}$ per lengte-eenheid over het aangegeven traject en L de lengte van het beschouwde traject.

Uit de vorige tabel blijkt dat chloride, totaalfosfaat en orthofosfaat zeer duidelijk een verandering ondergaan en dat zwevende stof eerst sterk afneemt en na de Moerdijkbrug slechts gering verandert. De relatief grote onbetrouwbaarheidsdrempel α bij zwevende stof wordt veroorzaakt door enkele uitschieters.

De beschreven methode ter bepaling van de voorwaardelijke spreiding is nog niet toegepast op de bemonsteringsgegevens; daarvan kunnen dan ook geen resultaten vermeld worden.

5.3 De resultaten van het uitgebreide model voor de diverse stoffen

5.3.1 Chloride

5.3.1.1 Algemeen

Met het uitgebreide model

$$c_{ij} = e^{\alpha_j + \lambda_o \beta_i \gamma_j} \quad ; \quad \sum_i \beta_i = 0 \quad ; \quad (5.3.1.1)$$

$$\sum_i \beta_i^2 = 1 \quad ; \quad \sum_j \gamma_j^2 = 1$$

waarin

$$\alpha_j = \frac{1}{m} \sum_i \log c_{ij}$$

worden $\hat{\alpha}_j$, $\hat{\lambda}_o$, $\hat{\beta}_i$ en $\hat{\gamma}_j$ zodanig bepaald dat de afwijkingen tussen $\log(c_{ij}) - \hat{\alpha}_j$ en de schattingen $\hat{\lambda}_o \hat{\beta}_i \hat{\gamma}_j$ minimaal zijn in de zin der kleinste kwadraten.

In hoofdstuk 3 is de fysische betekenis van de variabelen beschreven voor diverse toestanden. Tevens wordt in dat hoofdstuk gekeken naar de overeenkomst van of de verschillen tussen het algemene en het uitgebreide model. Om overeenkomst of verschil in resultaten van de twee modellen na toepassing op de gegevens van het Hollands Diep en Haringvliet te beschouwen, worden de berekende plaats- resp. tijdfuncties voor iedere stof vergeleken (alleen periode 1972^x + 1973).

Om onduidelijkheden bij het vergelijken van $\hat{\alpha}_j$, $\hat{\beta}_i$ en $\hat{\gamma}_j$ van de twee modellen te voorkomen, worden de variabelen van het algemene model van een index I voorzien en de variabelen van het uitgebreide model van een index II. De te beschouwen variabelen zijn dus $\hat{\beta}_i^I$, $\hat{\gamma}_j^I$, $\hat{\beta}_i^{II}$ en $\hat{\gamma}_j^{II}$.

5.3.1.2 De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$

De plaatsfuncties $\hat{\beta}^{II}$ van chloride voor de perioden 1972^x + 1973, 1972 en 1973, die worden berekend met het uitgebreide model, zijn getekend in de figuren 5.21 t/m 5.24.

Het verloop van de plaatsfunctie is nagenoeg gelijk aan de plaatsfunctie van het algemene model ($\hat{\beta}^I$); constant op het traject Gorkum-Moerdijk, daarna een plotselinge verlaging ten gevolge van het Maaswater en vanaf Moerdijk een toename in westelijke richting.

Deze toename op het traject Moerdijk-Haringvlietsluizen lijkt lineair afhankelijk van de plaats. De plaatsafhankelijkheid van de concentratie is in dat gebied dus bij benadering evenredig met exp. (kx), waarbij k een konstante is.

Bij de theorie is uitgegaan van een situatie waarbij de stroming bij benadering een propstroom is. In dat geval is de concentratie (bij afwezigheid van lozingen) op iedere plaats dezelfde, dus plaatsonafhankelijk. Bekend is echter dat via de Volkerak- en Haringvlietsluizen zout water het onderzoeksgebied binnendringt. De invloed van dit zoute water beperkt zich niet tot de direkte omgeving van de sluizen; de zoute onderstroom dringt zeer ver (Nieuwe Merwede/Amer) in oostelijke richting door. De aanname van een propstroom is blijkbaar onjuist. Als wordt aangenomen dat er een propstroming aanwezig is, moet de zoute onderstroming als een zijdelings lozing van zout water worden opgevat. De invloed van de zoute onderstroom op de concentratie neemt af in oostelijke richting en lijkt, uitgaande van de plaatsfunctie $\hat{\beta}$, na de Moerdijkbrug verwaarloosbaar.

Interessant is nog het vergelijken van de plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$ van het uitgebreide model met de plaatsfunctie $\hat{\beta}^I$ van het algemene model (figuur 5.47). De beschouwde periode is 1972^x + 1973.

Hoewel de verschillende $\hat{\beta}^I$'s slechts weinig van de gemiddelde waarde van $\hat{\beta}^I$ afwijken, is er toch duidelijk een rechtlijnig verband tussen $\log(\hat{\beta}^I)$ en $\hat{\beta}^{II}$. Beschouwing van $\hat{\beta}^I$ en $\hat{\beta}^{II}$ levert dan ook dezelfde resultaten op (zie hoofdstuk 5.2.1.2).

5.3.1.3 De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$

De tijdfunctie $e^{\hat{\alpha}}$ geeft een over alle stations gemiddeld gehalte aan op de tijdstippen t_j voor $j = 1, \dots, n$ voor het Hollands Diep-Haringvliet volgens:

$$\hat{\alpha}_j = \frac{1}{m} \sum_i^m \log c_{ij} \quad (5.3.1.2)$$

De verwachting is dat $e^{\hat{\alpha}}$ overeenkomt met het concentratieverloop op een centraal gelegen punt in het Hollands Diep-Haringvliet, waarvoor geldt $\beta_i = 0$. Bij het algemene model werd de tijdsafhankelijkheid van de concentratie beschreven door γ^I . Vergelijking van genoemde tijdfuncties (figuur 5.51) laat zien dat $\hat{\gamma}^I$ (figuur 5.17) en $e^{\hat{\alpha}}$ (figuur 5.37) op een konstante faktor na gelijk zijn! Voor de beschouwing van $e^{\hat{\alpha}}$ kan dus worden verwezen naar hoofdstuk 5.2.1.3.

De tijdfunctie γ^{II} tracht een eventuele tijdsafhankelijkheid in β^I te beschrijven. De tijdfunctie $\hat{\gamma}^{II}$ wordt zodanig berekend, dat de geschatte waarde

$$\hat{z}_{ij} = \hat{\lambda}_0 \hat{\beta}_i^{II} \hat{\gamma}_j^{II} \quad (5.3.1.3)$$

zo weinig mogelijk (kleinste kwadraten) van de uit de metingen berekende z_{ij} afwijkt. Bij een zuiver stationaire toestand zal α^{II} volgens de theorie voor ieder tijdstip t dezelfde waarde hebben. Is de situatie niet stationair, dan kan alleen in bijzondere gevallen (quasi-stationaire situatie en $u(x,t) = u(x) \cdot u(t)$; zie hoofdstuk 3) een fysische betekenis aan γ^{II} worden toegekend. Bij niet konserveerbare stoffen kan $\hat{\gamma}^{II}$ in quasi-stationaire situaties (zonder lozingen), waarin geldt $u(x,t) = u(x) \cdot u(t)$, gerelateerd worden aan de reciproke stroomsnelheid $1/u(t)$.

Voor konserveerbare stoffen zoals chloride, heeft $\hat{\gamma}_j^{II}$ geen fysische betekenis, tenzij de lozingen als een eerste orde proces (kunnen) worden opgevat.

In een instationaire situatie is het enige nut van γ^{II} dat een geringere afwijking tussen geschatte en werkelijke concentratie, wordt verkregen.

Nu is de toestand in het Hollands Diep-Haringvliet zeker niet stationair en lang niet altijd en overal quasi-stationair. De uit een dergelijke periode berekende $\hat{\gamma}^{II}$ kan dan ook een verloop hebben, dat niet met $1/u(t)$ overeenkomt.

Een bijkomend probleem is dat de stroomsnelheden niet worden gemeten. We kunnen dus slechts onderzoeken of het verloop van $\hat{\gamma}^{II}$ overeenkomt met de reciproke afvoer $1/Q(t)$. De laatstgenoemde overeenkomst zal echter in het algemeen geringer zijn dan tussen $\hat{\gamma}^{II}$ en $1/u(t)$.

5.3.2 Totaalfosfaat

5.3.2.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$

De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$, berekend met het uitgebreide model, is voor verschillende perioden getekend in figuur 5.25 t/m 5.28.

Gekonstateerd kan worden, dat ook hier een grote overeenkomst bestaat tussen $\log \hat{\beta}^I$ en $\hat{\beta}^{II}$ (zie figuur 5.48).

Voor de beschouwing van $\hat{\beta}^{II}$ kan daarom worden verwezen naar hoofdstuk 5.2.2.1.

5.3.2.2 De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$

Interessant is nu of voor het totaalfosfaat de tijdfunctie $e^{\hat{\alpha}}$ (figuur 5.38) overeenkomt met $\hat{\gamma}^I$ (figuur 5.18). Uit figuur 5.52, waar $e^{\hat{\alpha}}$ is getekend als functie van de tijdfunctie $\hat{\gamma}^I$, blijkt de overeenkomst tussen $e^{\hat{\alpha}}$ en $\hat{\gamma}^I$ evenals bij chloride zeer groot.

Beschouwing van de tijdfunctie $e^{\hat{\alpha}}$ geeft dan ook dezelfde informatie als beschouwing van $\hat{\gamma}^I$ (hoofdstuk 5.2.2.2).

De tijdfunctie $\hat{\gamma}^{II}$ heeft voor het totaalfosfaat een grillig verloop.

Vergelijking van $\hat{\gamma}^{II}$ met de reciproke afvoer levert slechts een geringe overeenkomst op.

5.3.3 Orthofosfaat

5.3.3.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$

Ook bij het orthofosfaat is de overeenkomst van de plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$ en $\log \hat{\beta}^I$ groot (figuur 5.49). Opvallend is echter dat $\hat{\beta}^{II}$ nagenoeg recht evenredig is met de plaats (figuur 5.29 t/m 5.32).

Slechts de bemonsteringsstations BM13 en BM24 nabij de splitsing Nieuwe Merwede en Boven Merwede wijken hier enigszins vanaf (evenals bij totaalfosfaat). Dit houdt in dat de plaatsafhankelijkheid van het orthofosfaatgehalte evenredig is met $\exp(-kx)$, waarbij k een konstante is. Omdat een dergelijk resultaat ook bij het totaalfosfaat werd verkregen, zijn de plaatsfuncties van beide stoffen vergeleken (figuur 5.56). De overeenkomst is vrij goed. Voor een beschouwing van de plaatsfunctie kan ook hier naar 5.2.3.1 verwezen worden.

5.3.3.2 De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$

De overeenkomst van $e^{\hat{\alpha}}$ en $\hat{\gamma}^I$ voor het orthofosfaatgehalte blijkt overduide-

lijk uit figuur 5.53.

In figuur 5.55 is nog de overeenkomst van de tijdfunctie $e^{\hat{\alpha}}$ van totaal- en orthofosfaat beschouwd. Het resultaat is een puntenwolk waaruit blijkt dat, indien aangenomen wordt dat totaalfosfaat recht evenredig is met orthofosfaat, de evenredigheidskonstante van totaalfosfaat en orthofosfaat ligt tussen 2.0 en 1.4 met een gemiddelde waarde van 1.7. De overeenkomst tussen $\hat{\gamma}^{II}$ en de reciproke afvoer is voor orthofosfaat groter dan voor totaalfosfaat. Toch is de overeenkomst niet zodanig dat daarmee uitspraken kunnen worden gedaan over de aard van de stromingstoestand.

De overeenkomst wijst in de richting van een koppeling tussen ortho- en totaalfosfaat, hetgeen wellicht verklaard kan worden door de relatief belangrijke fraktie die orthofosfaat van het totaalfosfaat uitmaakt.

5.3.4 Zwevende stof

5.3.4.1 De plaatsfunctie $\hat{\beta}^{II}$

Ook voor het zwevende stofgehalte berekent het uitgebreide model ongeveer dezelfde plaatsfunctie als het algemene model (figuur 5.50).

Waarschijnlijk, omdat de bepaling van het zwevende stofgehalte (nog) niet nauwkeurig mogelijk is, hetgeen van invloed is op de spreiding in $\hat{\beta}^I$, $\hat{\gamma}^I$, $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}^{II}$ en $\hat{\gamma}^{II}$, is de overeenkomst tussen $\hat{\beta}^{II}$ en $\log \hat{\beta}^I$ iets minder groot dan bij chloride, totaal- en orthofosfaat.

5.3.4.2 De tijdfuncties $\hat{\alpha}$ en $\hat{\gamma}^{II}$

De overeenkomst van $e^{\hat{\alpha}}$ en $\hat{\gamma}^I$ blijkt ook voor het zwevende stof groot (figuur 5.54). De tijdfunctie $\hat{\gamma}^{II}$ bij het zwevende stof heeft weliswaar een iets minder grillig verloop dan bij de overige stoffen, maar verschaft ook hier geen wezenlijke fysische informatie.

5.3.5 Nadere (statistische) analyse van de plaatsfunctie β

In hoofdstuk 4.4 is ingegaan op twee vormen van de toets van Spearman. Deze voor het algemene model afgeleide betrekkingen gelden in principe natuurlijk ook voor het uitgebreide model.

Allereerst wordt weer de toets van Spearman toegepast op $\hat{\beta}$ als functie van x . De nulhypothese H_0 is nu dat er geen rangkorrelatie is tegen de alternatieve hypothese H_1 , dat er een toe- of afname van de plaatsfunctie $\hat{\beta}_1$ binnen het beschouwde gebied is.

De toetsingsgrootte is voor 4 stoffen berekend in tabel 5.10.

Wensen we tweezijdig te toetsen met $\alpha = 0.01$, dan blijkt (tabel 5.7) de nulhypothese H_0 , waaronder geen rangkorrelatie bestaat tussen de positie x en de plaatsfunctie $\hat{\beta}$ bij alle beschouwde stoffen te worden verworpen! Dit houdt in dat $\hat{\beta}$ voor chloride toeneemt en totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof afneemt in westelijke richting.

Ook voor het uitgebreide model wordt een poging gedaan om met behulp van de aangepaste toets van Spearman een ondergrens voor de afname van $\hat{\beta}$ over een bepaald traject te bepalen bij een onbetrouwbaarheidsdrempel α .

Stel dat de afname van $\hat{\beta}$ per lengte-eenheid gelijk is aan p_1 , dan wordt getoetst of er nog rangkorrelatie aanwezig is tussen x_i en $y_i = \hat{\beta}_i - p_0 x_i$. Kies b.v. $p_0 = \frac{3}{4} p_1$. Op dezelfde wijze als in hoofdstuk 5.2.5 wordt nu de toetsingsgrootheid d^2 bepaald (zie tabel 5.11). De afname van $\hat{\beta}$ over het beschouwde traject, de onbetrouwbaarheidsdrempel van de toets en het toetsingsresultaat zijn in onderstaand schema aangegeven.

stof	$\Delta\hat{\beta}=p_1 L$	$p > p_0$	α (eenzijdig)	traject
chloride	-0.55	$p_0 = \frac{3}{4} p_1$	$\alpha = 0.005$	Moerdijk-zee
totaalfosfaat	0.60	$p_0 = \frac{3}{4} p_1$	$\alpha = 0.005$	Gorkum-zee
orthofosfaat	0.72	$p_0 = \frac{3}{4} p_1$	$\alpha = 0.005$	Gorkum-zee
zwevende stof	0.50	$p_0 = \frac{1}{2} p_1$	$\alpha = 0.10$	Gorkum-Moerdijk
zwevende stof	0.25	$p_0 = \frac{1}{2} p_1$	$\alpha = 0.10$	Moerdijk-zee

Uitgaande van het uitgebreide model geldt voor de relatieve afname van de concentratie op een bepaald traject (4.4.5)

$$\frac{1}{c(x,t)} \cdot \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = \lambda_0 \gamma(t) \cdot \frac{\partial \hat{\beta}(x)}{\partial x} \quad (5.3.1)$$

waaruit blijkt dat de relatieve afname van de concentratie in een bepaalde periode slechts met behulp van de verkregen resultaten kan worden berekend, als de tijdfunctie γ konstant is in de tijd, dan wel een gemiddelde waarde van $\gamma(t)$ wordt berekend als $\gamma(t)$ niet te sterk varieert in de tijd.

De grafische weergave van $\hat{\gamma}$ voor 4 stoffen (figuur 5.41 t/m 5.44) maakt duidelijk dat $\hat{\gamma}$ zeer sterk varieert in de tijd en zelfs op enkele tijdstippen van teken verandert! Om de afname van de concentratie en van de plaatsfunctie in een stationaire toestand te schatten, wordt daarom verondersteld dat $\gamma = \text{konstant} = \frac{1}{\sqrt{n}}$.

Daarmee kan volgens vergelijking (5.3.1) de relatieve afname van de concentratie worden geschat:

$$\frac{\Delta c_{.j}}{c_{.j}} = \lambda_o \gamma_j \Delta \beta = \frac{\lambda_o}{\sqrt{n}} \Delta \beta \quad (5.3.2)$$

waarbij verondersteld is dat β in stationaire en niet-stationaire toestand gelijk is. Om na te gaan hoe significant de relatieve verandering op het beschouwde traject is, wordt in analogie met het algemene model voor $\Delta \hat{\beta}$ in (5.3.2) $\frac{1}{3} \Delta \hat{\beta}$ gebruikt.

stof	$\hat{\lambda}_o$	$\gamma = \frac{1}{\sqrt{n}}$	$\Delta \hat{\beta} = p_1 L$	$(\Delta \hat{\beta}) \hat{\lambda}_o \gamma$	$(\frac{1}{3} \Delta \hat{\beta}) \hat{\lambda}_o \gamma$	traject
chloride	4.11	0.13	-0.55	-30%	-22%	Moerdijk-zee
totaalfosfaat	7.91	0.13	0.60	62%	46%	Gorkum-zee
orthofosfaat	5.89	0.13	0.72	55%	41%	Gorkum-zee
zwevende stof	14.3	0.13	0.50	93%	46% x)	Gorkum-Moerdijk
zwevende stof	14.3	0.13	0.25	46%	23% x)	Moerdijk-zee

De resultaten van het uitgebreide model komen redelijk overeen met de resultaten van het algemene model (zie onderstaande tabel). Bij het algemene model is het verloop van de tijdfunctie γ echter niet meer belangrijk voor het bepalen van de relatieve afname van de concentratie, terwijl dit bij het uitgebreide model wel het geval is.

algemene model			uitgebreide model			beschouwde traject
geschatte verandering van de concentratie	verandering groter dan	α	geschatte verandering van de concentratie	verandering groter dan	α	
-28%	-20%	0.005	-30%	-22%	0.005	Moerdijk-zee
54%	40%	0.005	62%	46%	0.005	Gorkum-zee
52%	40%	0.005	55%	41%	0.005	Gorkum-zee
70%	35%	0.10	93%	46%	0.10	Gorkum-Moerdijk
40%	20%	0.10	46%	23%	0.10	Moerdijk-zee

x) Hierbij is $\frac{1}{3} \Delta \hat{\beta}$ gehanteerd i.p.v. $\frac{2}{3} \Delta \hat{\beta}$!

5.4 Interpretatie van de resultaten

Interpretatie van de modelresultaten voor chloride, totaalfosfaat, orthofosfaat en zwevende stof met betrekking tot waterkwaliteitsprocessen vindt, gezien de overeenkomst tussen de resultaten van het algemene en uitgebreide model, plaats aan de hand van de informatie die met het algemene model is verkregen.

Het verloop van het chloridegehalte op het traject Nieuwe Merwede - Hollands Diep - Haringvliet, zoals dat uit de resultaten van het algemene model naar voren komt, komt overeen met het in hoofdstuk 2 geschetste karakteristieke verloop: een konstant gehalte op de Nieuwe Merwede, vervolgens een plotse dalende nabij Moerdijk, omdat daar samenvloeiing van Nieuwe Merwede en Amer plaatsvindt en ten westen van de Moerdijkbrug een voortdurende toename van het chloridegehalte door de penetratie van zout water via de Haringvliet- en Volkeraksluizen.

Het via de Haringvlietssluisen binnendringende zoute water heeft een geringe invloed op het concentratieverloop in het Haringvliet, indien de Haringvlietssluisen bij hoge Lobith-afvoer geopend zijn ($Q_L > 1700 \text{ m}^3/\text{s}$). Hetzelfde geldt ten aanzien van de beïnvloeding van het concentratieverloop door het Maaswater. De afname van de concentratie bij Moerdijk is geringer naarmate de afvoer bij Lobith hoger is.

De geschatte relatieve toename van het chloridegehalte op het traject Moerdijk - Haringvlietssluisen in de periode 1972^x + 1973 is 28%. Bij een onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.005$ is de toename groter dan 20%.

Voor wat betreft de tijdsafhankelijkheid van de chlorideconcentraties in Haringvliet, Hollands Diep en Nieuwe Merwede blijkt een nauwe samenhang te bestaan met de afvoer bij Lobith.

De totaalfosfaatconcentratie neemt op het traject Nieuwe Merwede, Hollands Diep en Haringvliet sterk af. De geschatte afname op dit traject is circa 55%. Bij een onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.005$ is de relatieve afname van het totaalfosfaatgehalte groter dan 40%. De afname is het grootst in de Nieuwe Merwede en wordt geringer in westelijke richting. Op grond van een eerste orde sedimentatieproces zou de afname in de Nieuwe Merwede gezien de relatief hoge stroomsnelheid (figuur 2.17) juist geringer moeten zijn dan in het Hollands Diep of Haringvliet. Gelet op de resultaten van het gehalte zwevende stof kan een verklaring voor dit verschil zijn dat het fosfaat voor een belangrijk deel gekoppeld is aan de slibfractie die sedimenteert in de Nieuwe Merwede. De sedimentatiekonstante k is dus niet konstant, maar afhan-

kelijk van het verloop van de stroomsnelheid.

Naast de sedimentatie ten gevolge van snelheidsveranderingen, vindt ook indirect sedimentatie van fosfaat plaats via het afsterven van algen. Dat de totaalfosfaatkonzentratie in de Dordsche Kil hoger is dan in het Hollands Diep wordt waarschijnlijk veroorzaakt door de grotere stroomsnelheden in de Dordsche Kil. Hierdoor vindt opwerveling van slib plaats, hetgeen ook blijkt uit de gegevens van het gehalte aan zwevende stof.

De relatieve afname van het orthofosfaat blijkt ongeveer gelijk te zijn aan de relatieve afname van het totaalfosfaat. De geschatte afname van de concentratie is circa 50%. Bij een onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.005$ is de afname meer dan 40%.

Het gehalte aan orthofosfaat kan afnemen door produktiviteit van plantaardige organismen in voorjaar en zomer, waardoor het orthofosfaat voor een gedeelte wordt omgezet in organisch celmateriaal of door fysisch/chemische processen zoals coagulatie, flocculatie en adsorptie aan deeltjes gevolgd door sedimentatie (lit. [10]).

Het gehalte aan zwevende stof vertoont een zeer sterke afname ($\approx 70\%$) op de Nieuwe Merwede en een geringere afname ($\approx 40\%$) in het Hollands Diep en Haringvliet. Bij een onbetrouwbaarheidsdrempel $\alpha = 0.10$ is de afname op de Nieuwe Merwede groter dan 35% en in het Hollands Diep - Haringvliet groter dan 20%. Bij het totaalfosfaat is reeds uiteengezet dat de relatief grote afname op de Nieuwe Merwede waarschijnlijk het gevolg is van het sedimenteren van de zware slibfractie. Voorts blijkt de relatieve afname van de concentratie lager naarmate de afvoer hoger is. Door de hoge stroomsnelheden, die bij hoge afvoer optreden (Haringvlietssluisen geopend), is de afname van de concentratie gering.

In het verloop van de concentratie aan zwevende stof als functie van de tijd vallen de snelle en grote veranderingen op. Vergelijking van de afvoer bij Lobith met de concentratie aan zwevende stof toont aan dat er slechts een geringe korrelatie aanwezig is. Een verklaring hiervoor is waarschijnlijk het dynamische karakter van de afvoer. De concentratie aan zwevende stof wordt niet alleen bepaald door de afvoer op het bemonsteringstijdstip, maar tevens door de afvoer in de voorgaande periode. Bij een toenemende afvoer in de aan de bemonstering voorafgaande periode zal de concentratie aan zwevende stof door uitspoeling groter zijn dan na een periode van hoge afvoer.

Andere "lokale lozingsbronnen" dan Haringvlietsluizen, Volkeraksluizen en Amer kunnen met de resultaten van het algemene en uitgebreide model (nog) niet worden aangetoond. Het aantonen van andere dan de reeds genoemde lozingspunten met behulp van een t-toets is alleen mogelijk nadat schatting van de spreiding op de in het rapport beschreven wijze heeft plaatsgevonden. Het is echter niet te verwachten dat de belangrijke lozing van afvalwater via de persleiding van Breda met behulp van de verkregen resultaten kan worden aangetoond. Dit wordt veroorzaakt door de ongunstige ligging van het lozingspunt, omdat zowel afvoer als concentratie zich op dit punt wijzigen. Slechts indien de concentraties op de Nieuwe Merwede en Amer gelijk zijn, wordt het mogelijk de aanwezigheid van de persleiding aan te tonen en de invloed ervan op het verloop van de concentratie kwantitatief te beschrijven.

6 Konklusies en aanbevelingen

Konklusies:

Ten aanzien van de ontwikkelde modellen voor het beschouwde gebied kunnen de volgende konklusies getrokken worden:

- . Met de ontwikkelde modellen kan de plaats- en tijdsafhankelijkheid van meet- en bemonsteringsgegevens op verantwoorde wijze bepaald worden door middel van orthogonale dekompositie van de gegevensmatrix.
- . De resultaten van de modellen kunnen gebruikt worden om optredende waterkwaliteitsprocessen nader te beschouwen.
Daarvoor is naast theoretische achtergrondinformatie van de methodieken kennis van de mogelijke fysische, chemische of biologische processen en lozingen en onttrekkingen in het beschouwde gebied noodzakelijk.
- . Hoewel het uitgebreide model in principe meer fysische informatie oplevert dan het algemene model, is de uit de bemonsteringsgegevens van het Hollands Diep, de Haringvliet en de Nieuwe Merwede verkregen informatie voor beide modellen overeenkomstig hetgeen veroorzaakt wordt door de hydraulische situatie in het beschouwde gebied.
- . Indien de beschouwde matrix ontbrekende waarnemingen bevat, wordt bij toepassing van het algemene model aangenomen, dat toch het absolute minimum van de kwadratensom wordt bereikt; deze procedure kan voor het uitgebreide model niet worden toegepast, aangezien in het algemeen geldt:

$$\sum_i^m p_{ij} \hat{v}_i \hat{w}_j \neq 0$$

Nader onderzoek hieromtrent is noodzakelijk.

- . Bij afwezigheid van ontbrekende waarnemingen wordt de keuze tussen het algemene en uitgebreide model in sterke mate bepaald door de hydraulische situatie in het beschouwde gebied.
- . Bij beide modellen kan een voorwaardelijke spreiding in de resultaten worden berekend. Deze spreiding zal echter in het algemeen kleiner zijn dan de totale spreiding in de verkregen schatting.

Ten aanzien van de waterkwaliteitsprocessen in het beschouwde gebied kunnen mede op basis van de modelresultaten de volgende konklusies worden getrokken.

- . Het blijkt dat de waterhuishoudkundige situatie voornamelijk wordt be-

paald door de afvoer bij Lobith en het spuiprogramma van de Haringvliet-sluizen.

- . Het chloridegehalte is sterk afhankelijk van de afvoer bij Lobith en wordt in het beschouwde gebied voornamelijk beïnvloed door de penetratie van zout water via de Haringvliet- en Volkeraksluizen en door het samenvloei- en van de Amer met een relatief laag chloridegehalte en de Nieuwe Merwede.
- . De toename van de concentratie aan chloride in westelijke richting wordt geschat op 28%. De toename is bij een onbetrouwbaarheidsdrempel van 5% groter dan 20%.
- . De totaalfosfaatconcentratie neemt op het beschouwde traject zeer sterk af, namelijk circa 55%. Bij een onbetrouwbaarheidsdrempel van 5% is de afname groter dan 40%. De grootste afname treedt op in de Nieuwe Merwede, hetgeen waarschijnlijk veroorzaakt wordt door de koppeling van fosfaat aan de (zware) slibfractie die op dat traject sedimenteert. Naast sedimentatie ten gevolge van snelheidsveranderingen vindt indirect sidementatie van fosfaat plaats via het afsterven van algen.
- . De relatieve afname van orthofosfaat blijkt ongeveer gelijk aan die van totaalfosfaat: een geschatte afname van circa 50% en een afname van meer dan 40% bij een onbetrouwbaarheidsdrempel van 5%.
Het gehalte aan orthofosfaat kan afnemen door produktiviteit van plant-aardige organismen en fysisch/chemische processen zoals coagulatie, flocculatie en adsorptie gevolgd door sedimentatie.
- . Het gehalte aan zwevende stof neemt zeer sterk af (ca. 70%) op de Nieuwe Merwede en in iets geringere mate in het Hollands Diep en Haringvliet (ca. 40%). Bij een onbetrouwbaarheidsdrempel van 10% is deze afname respectievelijk groter dan 35% en 20%. De relatief grote afname van de concentratie op de Nieuwe Merwede wordt veroorzaakt door desimentatie van de zware slibfractie.
- . De invloed van andere "lokale lozingsbronnen" dan Haringvliet-sluizen, Volkeraksluizen en Amer kunnen uit de resultaten van de algemene en uitgebreide model (nog) niet worden afgeschat.

Aanbevelingen:

- . Nader onderzoek met betrekking tot de problematiek van ontbrekende waarnemingen is gewenst.
- . Nagegaan moet worden welke fysische achtergronden er aan de parameters van het uitgebreide model ten grondslag liggen.

- . Om na te gaan welke processen ten grondslag liggen aan de gesignaleerde concentratieveranderingen zal in een aantal gevallen aanvullend (procesgericht) onderzoek noodzakelijk zijn.
- . De ontwikkelde modellen bieden goede perspectieven voor toepassing op andere dan de nu beschouwde waterkwaliteitsparameters, waarbij het accent kan worden gelegd op de interpretatie van de resultaten met betrekking tot de waterkwaliteitsprocessen, de relatie tussen waterkwaliteit en waterkwantiteit en de relatie tussen waterkwaliteitsparameters onderling.

LITERATUUR

- 1 De waterkwaliteit in het Hollands Diep en Haringvliet, periode januari - december 1972; Projektgroep Hollands Diep/Haringvliet, Nota 74-09.
- 2 GROOT, S. Evaluatie van de nota's 73-08 en 74-09 van de projektgroep Hollands Diep en Haringvliet en enkele algemene beschouwingen over het toepassen van massabalansen, Mei 1977.
- 3 VERHAGEN, C.J.D.M. Metingen, Mei 1971.
- 4 Het lozingsprogramma voor de Haringvlietsluizen (NLP-'70) R.W.S.-Deltadienst, Waterloopkundige Afdeling.
Nota W.68.248
- 5 Afvoergegevens Noordelijk Deltabekken.
R.W.S.-Direktie Waterhuishouding en Waterbeweging.
Nota 11.003.03
- 6 LEHMAN. Nonparametrics, statistical methods based on ranks.
- 7 P.A.O.-cursusboek. Verdelingsvrije methoden.
- 8 HARRIS, R.R. A primer of multivariate statistics.
- 9 BAUMERT, H., en BRAUN, P. Zur Anwendung von Methoden der lineairen Systemtheorie bei der quantitativen Beschreibung von Wassergüteproblemen.
Acta Hydrophysica, Bd XXI, H 3-4 (1976) blz. 137-181.
- 10 ENGELBRECHT, H., en MORGAN, J. Studies of the occurrence and degradation of condensed phosphates in water.
Sewage Ind. Wastes, 31, 458-478.
- 11 GOOD, I.J. Some applications of the singular decomposition of a matrix.
Technometrics 11(1969)4, blz. 823-831.

LITERATUUR (vervolg)

- 12 WILLIAMS, E.J. The interpretation of interactions in factorial experiments.
Biometrika 39 (1952), 65-81.

p.o. box 177

delft

the netherlands