

nota

— instituut voor cultuurtechniek en waterhuishouding, wageningen —

Rob Heerink

ICW nota 1811

januari 1988

ALTERRA

Wageningen Universiteit & Research center
Omgevingswetenschappen
Centrum Water & Klimaat
Team Integraal Waterbeheer

ONDERZOEK NAAR DE EFFECTEN VAN WATERAANVOER EN PEILVERANDE-
RINGEN IN AGRARISCHE GEBIEDEN OP DE WATERKWALITEIT IN
NATUURGEBIEDEN

deel 7

Het gedrag van CO₂ in de bodem onder invloed van de
water/luchthuishouding en chemische evenwichten

ir. P. Groenendijk en drs. C.J. Ritsema

Nota's van het Instituut zijn in principe interne communicatie-
middelen, dus geen officiële publikaties.

Hun inhoud varieert sterk en kan zowel betrekking hebben op een
eenvoudige weergave van cijferreeksen, als op een concluderende
discussie van onderzoeksresultaten. In de meeste gevallen zullen
de conclusies echter van voorlopige aard zijn omdat het onderzoek
nog niet is afgesloten.

Bepaalde nota's komen niet voor verspreiding buiten het Instituut
in aanmerking

I N H O U D

LIJST VAN FIGUREN	i
LIJST VAN TABELLEN	iv
LIJST VAN APPENDICES	v
1. INLEIDING	1
2. WATER- EN LUCHTHUISHOUDING	4
2.1. Inleiding	4
2.2. WATBAL	4
2.3. SWATRE	6
3. TRANSPORT VAN CO ₂ IN DE BODEM	9
3.1. Oplosbaarheid van CO ₂	9
3.2. De transportvergelijking	11
3.3. Numerieke oplossing van de transportvergelijking	18
4. PRODUKTIE EN CONSUMPTIE VAN CO ₂ EN H ⁺	21
4.1. De produktie van CO ₂ in de bodem	21
4.2. De produktie en consumptie van H ⁺ als gevolg van nitrificatie en denitrificatie	22
5. KOPPELING AAN HET MODEL EPIDIM	25
6. RESULTATEN	28
6.1. Simulaties met de modellen WATBAL/BALANCE en SWATRE	28
6.1.1. Vocht- en luchtprofielen in de Tondense heide	28
6.1.2. Vocht- en luchtprofielen in Groot Zandbrink	33
6.1.3. Opmerkingen	36
6.2. Simulaties met het model ANIMO	39
6.3. Simulaties met het model EPIDIM	44
6.3.1. Presentatie van de veldgegevens	44
6.3.2. Presentatie van de berekeningen	56
6.3.3. Opmerkingen	64
LITERATUUR	66
APPENDICES	70

LIJST VAN FIGUREN

- Fig. 1. Schema van het transport van CO_2 in de wortelzone en de onverzadigde zone
- Fig. 2. Organische stof kringloop gemodelleerd volgens ANIMO
- Fig. 3. Schema van de verschijningsvormen van H^+ en CO_2 en de mogelijke chemische reacties
- Fig. 4. Stroomschema van de gekoppelde stoftransport/produktie/chemische evenwichtsberekeningen
- Fig. 5. Met WATBAL berekende afvoeren (*) uitgezet tegen de grondwaterstanden en de hieruit berekende Q-h relatie
- Fig. 6. Gemeten grondwaterstanden (*) en het met behulp van SWATRE berekende grondwaterstandsverloop in de Tondense heide voor het jaar 1986
- Fig. 7. Berekende vocht/luchtprofielen voor enkele dagen in 1986 voor de veldpodzol in de Tondense heide
- Fig. 8. Het vochttekort in Groot Zandbrink gedurende het jaar 1986 berekend met behulp van WATBAL en SWATRE
- Fig. 9. Gemeten vochtgehalten (*) en berekende vochtprofielen voor enkele dagen in 1981 voor de beekeerdgrond in Groot Zandbrink
- Fig. 10. Berekende vocht/luchtprofielen voor enkele dagen in 1986 voor de beekeerdgrond in Groot Zandbrink
- Fig. 11. Met ANIMO berekende CO_2 produkties voor 85/86, uitgezet tegen de tijd en tegen de bodemdiepte
- Fig. 12. Met ANIMO berekende O_2 -fracties van de bodemlucht voor 85/86, uitgezet tegen de tijd en tegen de bodemdiepte
- Fig. 13. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties als gevolg van nitrificatie/denitrificatie voor 85/86, uitgezet tegen de tijd en tegen de bodemdiepte
- Fig. 14. Berekende bodemluchtfracties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 15. Berekende fluxen in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 16. Gemeten EC-waarden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 17. Gemeten pH-waarden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

- Fig. 18. Gemeten HCO_3^- concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 19. Berekende CO_2 -spanningen in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 20. Gemeten totaal anorganisch koolstof gehalten in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 21. Gemeten SO_4^{--} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 22. Gemeten Ca^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 23. Gemeten Na^+ concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 24. Gemeten Mg^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 25. Gemeten Cl^- concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 26. Gemeten Ionen Ratio's in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 27. Gemeten CaCO_3 verzadigingsgraden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 28. Berekende CaCO_3 verzadigingsgraden met CO_2 concentraties in evenwicht met lucht in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 29. IJkings berekeningen voor Ca^{++} concentraties over 10 jaren
- Fig. 30. IJkings berekeningen voor Cl^- concentraties over 10 jaren
- Fig. 31. IJkings berekeningen voor de pH over 10 jaren
- Fig. 32. Gesimuleerde EC-waarden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 33. Gesimuleerde pH-waarden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 34. Gesimuleerde HCO_3^- concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 35. Gesimuleerde CO_2 -spanningen in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 36. Gesimuleerde SO_4^{--} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

- Fig. 37. Gesimuleerde Ca^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 38. Gesimuleerde Na^{+} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 39. Gesimuleerde Mg^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 40. Gesimuleerde Cl^{-} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 41. Gesimuleerde Ionen Ratio's in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte
- Fig. 42. Gesimuleerde CaCO_3 verzadigingsgraden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

LIJST VAN TABELLEN

- Tabel 1. Waarden voor de parameters p_1 en p_2 , gebruikt in vgl. (20)
- Tabel 2. Op jaarbasis berekende parameterwaarden voor de afvoer - grondwaterstand relaties en de bijbehorende correlatiecoëfficiënten voor de veldpodzollocatie in de Tondense heide
- Tabel 3. Waarden van een aantal parameters die bij de WATBAL berekeningen zijn gebruikt
- Tabel 4. Waarden van een aantal parameters die bij de SWATRE berekeningen zijn gebruikt ten behoeve van simulaties van de waterhuishouding van de veldpodzollocatie in de Tondense heide
- Tabel 5. Waarden van een aantal parameters die bij de SWATRE berekeningen zijn gebruikt ten behoeve van simulaties van de waterhuishouding van de beekeerdgrond in Groot Zandbrink
- Tabel 6. Algemene invoergegevens ten behoeve van berekeningen met ANIMO voor de beekeerdgrond in Groot Zandbrink
- Tabel 7. Schatting van de initiële hoeveelheid exudaten (EX) en humus afkomstig van exudaten (HUEX) per bodemlaag in kg.m^{-2}
- Tabel 8a. Schatting van de initiële hoeveelheid vers organisch materiaal per fraktie in kg.m^{-2}
- Tabel 8b. Schatting van de initiële hoeveelheid humus afkomstig van vers organisch materiaal per fraktie in kg.m^{-2}

LIJST VAN APPENDICES

- Appendix 1. Waarden van een aantal parameters die bij de WATBAL berekeningen zijn gebruikt
- Appendix 2. Waarden van een aantal parameters die bij de SWATRE berekeningen zijn gebruikt
- Appendix 3. In het laboratorium bepaalde pF en k- θ relaties voor de wortelzone en ondergrond van de beekeerdgrond in Groot Zandbrink
- Appendix 4. Waarden van een aantal parameters die bij de ANIMO berekeningen zijn gebruikt
- Appendix 5. Beschrijving van de invoer voor het computerprogramma TRAWOS / EPIDIM
- Appendix 6a. Ingevoerde concentraties zoals die vermeld staan in de file CRAIN.DAT
- Appendix 6b. Ingevoerde concentraties zoals die vermeld staan in de file CSEEP.DAT
- Appendix 7. Gegevens zoals die staan vermeld in de file CO2IN.DAT en zoals die zijn gebruikt bij de TRAWOS / EPIDIM berekeningen

1. INLEIDING

Vegetatietypen en plantensoorten reageren dikwijls kritisch op veranderingen in het abiotische milieu. De waterhuishouding van de wortelzone en de onverzadigde zone is op zichzelf een belangrijke standplaatsfactor. Daarnaast heeft het een sturende invloed op andere standplaatsfactoren, zoals de zuurgraad en het totaal zoutgehalte. Met behulp van fysisch/mathematische modellen kan het mechanisme van de bodemwaterhuishouding worden beschreven. Deze modellen beschrijven in mindere of meerdere mate ook de bodemluchthuishouding. De luchthuishouding kan worden opgevat als het complement van de waterhuishouding. DEN BESTEN (1986) definieert het begrip aeratie op dezelfde wijze. Aan het aspect dat O_2 en CO_2 van belangrijke betekenis zijn voor onder andere de stikstof- en zuurhuishouding wordt dan onvoldoende recht gedaan.

In enkele stikstofmodellen die bruikbaar zijn voor een ecologische toepassing, zoals ECONUM (MANKOR & KEMMERS, 1987) en ANIMO (BERGHUIJS-VAN DIJK et.al., 1985), vindt een berekening van de zuurstofdiffusie plaats.

In het kader van het project "Onderzoek naar de effecten van peilbeheer en aanvoer van gebiedsvreemd water in agrarische gebieden op de waterkwaliteit in natuurgebieden" dat door het ICW wordt uitgevoerd ten behoeve van de SWNBL, is een model ontwikkeld dat het transport van chemische componenten simuleert. Naast het transport van H^+ , Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , HCO_3^- en SO_4^{--} in de waterfase wordt ook het transport van CO_2 in de luchtfase in beschouwing genomen. Het transport van HCO_3^- en CO_2 vindt gekoppeld plaats. De basisvergelijking voor het stoftransport wordt in hoofdstuk 3 afgeleid.

Het ontstane transportmodel TRAWOS (TRANsport in Air and Water of Solutes) wordt toegepast op niet-stationaire stromingssituaties in het bodemprofiel. Voor het ontwikkelde simulatiemodel is per tijdstap onder andere invoerinformatie nodig met betrekking tot de in het bodemprofiel voorkomende waterfluxen, vochtgehalten en luchtgehalten. Deze informatie wordt afgeleid uit berekeningen met modellen die de bodemwaterhuishouding beschrijven.

Het transport van gassen vindt voornamelijk door diffusie in de lucht-fase plaats. Het luchtgehalte is van grote invloed op de hoeveelheid gas die kan diffunderen. De modellen SWATRE (BELMANS et.al., 1983) en WATBAL (BERGHUIJS-VAN DIJK, 1985) zijn toegepast op een veldpodzol-grond van de Tondense heide en een beekeerdgrond van het natuurreserveaat Groot Zandbrink en zijn met elkaar vergeleken ten aanzien van de luchthuishouding.

Het model SWATRE levert op gedetailleerde schaal informatie over de vocht- en luchtgehalten en de waterfluxen in de verticale richting. De combinatie van het model WATBAL met de subroutine BALANCE uit het model ANIMO (BERGHUIJS-VAN DIJK et.al., 1985) levert op iets minder gedetailleerde schaal dezelfde informatie en heeft de mogelijkheid om zijdelingse waterfluxen te berekenen van water dat naar greppels, drains of grotere ontwateringsmiddelen stroomt. De carbonaathuishouding heeft een belangrijke invloed op de zuurgraad van het bodemmilieu. Als belangrijke carbonaatbronnen kunnen carbonaatmineralen, kwelwater, de organische stofhuishouding en CO_2 uit de lucht worden genoemd.

De produktie van CO_2 door de afbraak van organische stof wordt afgeleid uit de koolstofbalans, zoals die wordt gesimuleerd met het model ANIMO (BERGHUIJS-VAN DIJK et.al., 1985). Het model ANIMO dat als doel heeft de stikstofhuishouding te simuleren, levert tevens waarden voor de zuurstofconcentraties in de bodemlucht.

De gedetailleerde beschrijving in dit model van omzettingsprocessen waarbij nitraat is betrokken, levert tevens de mogelijkheid om de hoeveelheden H^+ ionen die bij deze processen worden geproduceerd of geconsumeerd te berekenen. De berekende hoeveelheden CO_2 en H^+ worden in het chemisch evenwichtsmodel EPIDIM (GROENENDIJK, 1987) als externe informatie ingevoerd, zodat kan worden gesproken van een koppeling op afstand.

Deze koppeling levert een instrument op waarmee diverse milieueffecten kunnen worden gesimuleerd:

- * de effecten van peilveranderingen en peilbeheer op de lucht- en vochtvoorziening in de bodem;
- * de effecten van peilveranderingen en peilbeheer op de waarden van de waterkwaliteitsparameters zoals de pH, $[\text{Ca}^{++}]$, $[\text{Cl}^-]$, EC, kalkpotentiaal, kalkvorming en CO_2 evenwichten;

- * de effecten van de infiltratie van gebiedsvreemd water op de genoemde waterkwaliteitsparameters;
- * de effecten van zuur- en stikstofdepositie, N-bemesting en bekalking op de concentraties van de genoemde componenten en de zuurgraad in het bodemwater.

De ondergrens voor wat betreft de zuurgraad ligt ongeveer bij pH = 4. In het zuurdere traject gaan aluminiumevenwichten en -mineralen een rol spelen die in dit model nog niet zijn gemodelleerd. Door de formulering van de hydrologie in WATBAL/BALANCE is het model in principe geschikt voor berekeningen op diverse schalen:

- * standplaats;
- * perceel;
- * regionaal.

Voor toepassingen op perceels- en regionaal niveau moet de gebruiker van het model de bodemkundige gegevens en initiële waterkwaliteitsgegevens van de beschouwde rekeneenheid zelf aggregeren.

Een aantal parameters die in de modellen EPIDIM en ANIMO worden gebruikt zijn ingeschat aan de hand van elders verkregen data en 'expert judgement'.

Een calibratie en gedeeltelijke verificatie van het model is uitgevoerd door simulaties van de waterkwaliteit voor het genoemde bodemprofiel in Groot Zandbrink. De berekende concentraties zijn vergeleken met aldaar in 1985 en 1986 verzamelde gegevens.

2. WATER- EN LUCHTHUISHOUDING

2.1. Inleiding

Ter berekening van de water- (en lucht)huishouding van de wortelzone en de onverzadigde zone in de bodem zijn er op het ICW meerdere computermodellen ontwikkeld. Twee daarvan worden momenteel veelvuldig gebruikt, te weten WATBAL (BERGHUIJS-VAN DIJK, 1985) en SWATRE (BELMANS et.al., 1983).

WATBAL is ontwikkeld voor de berekening van een aantal hydrologische grootheden die kunnen dienen als invoerinformatie voor waterkwaliteitsmodellen. Bij de koppeling van WATBAL met de subroutine BALANCE uit het model ANIMO (BERGHUIS-VAN DIJK et.al., 1985) wordt een model verkregen dat uitvoer geeft die te vergelijken is met die van SWATRE. Beide modellen kunnen toegepast worden om gedurende een bepaalde periode voor een bepaalde locatie in het veld de vocht- (en lucht)-huishouding van de bodem te berekenen als functie van het in te voeren gewas, de bodemfysische, de hydrologische en de meteorologische parameters.

Resultaten van simulaties met deze twee modellen voor een bepaald gebied kunnen met elkaar vergeleken worden indien de verschillende invoerparameters zoveel mogelijk op elkaar afgestemd zijn. In de resultaten dienen dan de door WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende waterbalansen allereerst met elkaar vergeleken te worden. Mocht blijken dat de berekende waterbalansen van beide modellen min of meer met elkaar overeenkomen dan is een vergelijking van de eveneens berekende vocht- en luchtprofielen relatief eenvoudig indien het aantal onderscheiden rekencompartimenten in beide modelsimulaties gelijk is.

2.2. WATBAL

In WATBAL kan gebruik gemaakt worden van een zelf te kiezen rekentijdstap. Bij de modelontwikkeling van WATBAL is deze keuze bewust gemaakt om tegen een gering gebruik van computertijd eenvoudig langjarige berekeningen te kunnen uitvoeren. In WATBAL worden twee bodemlagen

onderscheiden, de wortelzone en de ondergrond. Het model berekent analytisch per tijdstap de veranderingen in vochtgehalte in deze twee lagen en de veranderingen in grondwaterstand als gevolg van neerslag, verdamping, transport van wortelzone naar ondergrond, capillaire opstijging van de ondergrond naar de wortelzone en afvoer naar verschillende drainagesystemen.

Er kunnen 4 drainagesystemen worden onderscheiden:

- 1) kwel/wegzijging;
- 2) kanalen en grotere ontwateringsmiddelen (basisdrainage);
- 3) beken en sloten (snelle drainage);
- 4) greppels (interflow).

WATBAL is dus als een eenvoudig pseudo 2- of 3-dimensionaal model te beschouwen. Bij deze berekeningen wordt aangenomen dat het vocht in de wortelzone uniform over de diepte is verdeeld en in de ondergrond een lineaire relatie met de diepte vormt.

Een uitgebreide model beschrijving is te vinden in BERGHUIJS-VAN DIJK (1985).

De invoer van WATBAL bestaat uit een reeks van gewas, bodemkundige, hydrologische en meteorologische gegevens.

Wat betreft de gewasgegevens zijn de gewasfactoren en de bedekkingsgraden van het bodemoppervlak van belang. De bodemkundige gegevens bestaan uit de dikte van de onderscheiden lagen, de vochtfracties bij 'verwelkingspunt', 'veldcapaciteit' en verzadigingspunt, de verzadigde doorlatendheid van de wortelzone en de capillaire opstijgingshoogte. De hydrologische gegevens zijn uitgesplitst naar verschillende drainage systemen (kwel/wegzijging, kanalen, sloten, greppels) waarbij parameters als drainageniveau's, radiale weerstanden, drainage afstanden, drainagebasis, dikte van de doorstroomde laag, verzadigde doorlatendheid van de ondergrond en de weerstand van het eerste systeem (kwel/wegzijging) van belang zijn. De mogelijkheid bestaat om per tijdstap de drainageniveau's in te voeren. Op deze wijze wordt het mogelijk om scenario's met betrekking tot het peilbeheer door te rekenen.

Een speciale toepassing wordt verkregen als voor de weerstand van het eerste systeem een kleine waarde wordt gekozen, bijvoorbeeld 10 of 20 atmalen en per tijdstap de gemeten grondwaterstand als eerste draina-

geniveau wordt ingevoerd. De fluxen en de vochtvoorraad kunnen dan als functie van de grondwaterstand en de meteorologische gegevens worden berekend zonder dat de tweede, derde of vierde orde drainage middelen worden gedefinieerd.

Er dient voorts een drempelhoogte boven maaiveld opgegeven te worden waarboven oppervlakkige afstroming gaat optreden. Het model WATBAL kan dus met een stagnerende waterlaag op het maaiveld rekenen. Dit is van belang bij de ecologische toepassing in natte natuurgebieden. Er dient eveneens aangegeven te worden of vanuit het ingevoerde drainage systeem ook infiltratie kan plaatsvinden.

De meteorologische gegevens bestaan uit de neerslag en de open water-verdamping per tijdstap.

Voor een uitvoerige invoerbeschrijving van WATBAL wordt verwezen naar BERGHUIJS-VAN DIJK (1985) en KROES (1988).

De uitvoer van WATBAL bestaat uit een samenvatting van de ingevoerde modelparameters en een opsomming, per tijdstap, van de neerslaggegevens, potentiële en actuele verdamping, veranderingen in de totale vochtgehalten per bodemlaag en afvoeren naar de verschillende drainage systemen. Deze berekende waarden worden op cumulatieve wijze gepresenteerd.

In BALANCE wordt het bodemprofiel opgedeeld in een willekeurig aantal compartimenten van gewenste dikte. De geometrie van het bodemsysteem dient voor de start van de simulaties ingevoerd te worden.

De berekende veranderingen in het vochtgehalte van de twee bodemlagen (uitvoer WATBAL) worden in BALANCE uitgedrukt in veranderingen van het vochtgehalte per compartiment. Tevens wordt per tijdstap per compartiment de totale waterbalans opgesteld en de laterale fluxen naar de verschillende drainage systemen, de fluxen over de compartimentsgrenzen en de fluxen in de wortelzone ten gevolge van evapotranspiratie berekend en weergegeven.

2.3. SWATRE

SWATRE is een één-dimensionaal eindig differentieelmodel. De bodem kan opgebouwd zijn uit maximaal vijf verschillende lagen die opgedeeld kunnen worden in maximaal veertig (reken)compartimenten van gelijke

dikte. De, in een variabele kleine rekentijdstap, optredende toevoer of afvoer van water voor een bepaald compartiment i wordt berekend met behulp van de Wet van Darcy. In deze kleine rekentijdstap wordt verondersteld dat de drukhoogte uit de laatste tijdstap nog geldig is. Hierdoor zijn doorlatendheid, drukhoogtegradiënt en (eventuele) wateropname door plantenwortels bekend en de fluxen en waterbalansen (continuïteitsvergelijking) per compartiment te berekenen. Aan het eind van de betreffende tijdstap kan dan met behulp van de nieuw berekende vochtfractie per compartiment de drukhoogte worden berekend waarna vervolgens de berekeningen voor de volgende tijdstap worden gestart. Deze expliciete oplossingsmethode mag slechts worden toegepast bij gebruik van kleine tijdstappen.

Het samenstellen van de invoer voor SWATRE kan op verschillende manieren plaatsvinden afhankelijk van de specifieke omstandigheden die in de simulaties meegenomen dienen te worden.

SWATRE rekent één-dimensionaal waarbij aan de onderzijde van het profiel wegzijging en/of kwel kan optreden. Laterale fluxen uit het bodemprofiel richting greppels, sloten en kanalen worden niet direct in de berekeningen onderscheiden. Wil een vergelijking tussen simulaties met WATBAL en SWATRE in een gebied met verschillende drainage-systemen opgaan, dan is het in ieder geval noodzakelijk dat de berekende totaal afvoeren in WATBAL en SWATRE gelijk zijn. Dit kan op twee manieren gebeuren.

In de eerste plaats kunnen de totaal afvoeren die SWATRE berekend aanpast worden aan de totaal afvoeren die WATBAL berekend. Dit kan bereikt worden door in SWATRE een afvoer-grondwaterstandsdiepte relatie (ERNST & FEDDES, 1979) in te voeren die afgeleid is uit de berekende afvoeren uit WATBAL. Deze methode is toepasbaar in zandige wegzijgingsgebieden.

In de tweede plaats kunnen de gemeten grondwaterstandsdiepten zowel in SWATRE als in WATBAL als invoer dienen. Bij gebruik van deze optie worden de afvoeren berekend als functie van de opgegeven grondwaterstandsdiepten, meteorologische en bodemfysische condities. Deze methode kan ook toegepast worden in gebieden die gedurende langere of kortere tijd onder invloed staan van kwel.

De uitvoer van SWATRE bestaat uit een samenvatting van de, op dag-basis, ingevoerde gegevens, berekende potentiële en actuele verdampingen, grondwaterstanden en afvoeren. Als optie is het mogelijk om voor een aantal willekeurige dagen het berekende bodemvochtprofiel visueel te laten afdrukken. Tevens wordt er per dag een complete waterbalans opgesteld.

3. TRANSPORT VAN CO₂ IN DE BODEM

3.1. Oplosbaarheid van CO₂

De oplosbaarheid van CO₂ in lucht bedraagt $4,43-4,00 \cdot 10^{-4}$ mol.m⁻³. Pa⁻¹ en de oplosbaarheid van CO₂ in water bedraagt $7,59-2,95 \cdot 10^{-4}$ mol.m⁻³.Pa⁻¹ (GLINSKI and STEPNIIEWSKI, 1985). Voor de berekening van de hoeveelheid in water opgeloste CO₂ zijn de volgende evenwichten van belang:



Voor het instellen van deze evenwichten kunnen de volgende relaties worden gegeven (AMHREIN, 1986):

$$\frac{d[\text{CO}_2]_{\text{aq}}}{dt} = k_1[\text{CO}_2]_g - k_2[\text{CO}_2]_{\text{aq}} \quad (3)$$

en

$$\frac{d[\text{CO}_2]_{\text{aq}}}{dt} = k_3[\text{H}_2\text{CO}_3] - k_4[\text{CO}_2]_{\text{aq}} \quad (4)$$

met: $k_1 =$	150 - 200	(etm ⁻¹)
$k_2 =$	150 - 200	(etm ⁻¹)
$k_3 =$	5 - 20 * 10 ⁵	(etm ⁻¹)
$k_4 =$	2000 - 3500	(etm ⁻¹)

Deze waarden zijn afgeleid van waarden die zijn gegeven door STUMM & MORGAN (1981) en AMHREIN (1986).

De reactiesnelheden zijn zo groot dat het eerste evenwicht zich binnen een half uur zal instellen. De berekening van k_3 en k_4 is gebaseerd op een goed geaëreerd, snelstromend systeem. Als deze waarden met een factor 100 worden verkleind zal dit evenwicht zich nog binnen een halve dag instellen. Aangezien verder geen gegevens voorhanden zijn en de processen zich snel afspelen worden de instellingen van bovenstaande evenwichten als momentane processen beschouwd. Het totaal van in de waterfase aanwezige $\text{CO}_2(\text{aq}) + \text{H}_2\text{CO}_3$ wordt uitgedrukt als H_2CO_3^* . Bij 25°C en 1 atm is circa 4% van de H_2CO_3^* aanwezig als H_2CO_3 en de rest als $\text{CO}_2(\text{aq})$.

LANGMUIR (1986) geeft de verhouding tussen P_{CO_2} en H_2CO_3^* als een functie van de temperatuur met a, b, c, d en e als parameters.

$$[\text{H}_2\text{CO}_3^*]/P_{\text{CO}_2} = a + bT + c/T + d \log(T) + e/T^2 \quad (5)$$

met: $[\text{H}_2\text{CO}_3^*]$ = in de waterfase aanwezige $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{CO}_3$ (mol.l^{-1})

P_{CO_2} = partiële CO_2 druk (bar)

T = absolute temperatuur ($^\circ\text{K}$)

a = 108.3865

b = 0.01985076

c = -6919.53

d = -40.54154

e = 669365.0

De berekening van de concentratie van het CO_2 -gas uit de partiële CO_2 druk geschiedt volgens:

$$[\text{CO}_2]_g = \frac{101,3 * P_{\text{CO}_2}}{RT} \quad (6)$$

met: $[\text{CO}_2]_g$ = concentratie van CO_2 gas (mol.l^{-1})

R = gasconstante ($8,3143 \text{ J.mole}^{-1}.\text{K}^{-1}$)

T = absolute temperatuur ($^\circ\text{K}$)

Globaal geldt dat $[\text{CO}_2]$ -gasfase en $[\text{H}_2\text{CO}_3^*]$ -waterfase in de verhouding van 1.2:1 in het systeem voorkomt.

3.2. De transportvergelijking

Bij het transport van CO_2 in de bodem kunnen 2 systemen worden onderscheiden die van belang zijn:

- * vertikaal transport door "macro-poriën" die met water en lucht gevuld zijn;
- * horizontaal transport in de "micro-poriën" van bodemaggregaten. Deze micro-poriën zijn gevuld met water.

In het onderstaande concept wordt onderscheid gemaakt tussen een mobiele en een immobiele waterfase. Het gedeelte van het bodemwater dat zich in de "micro-poriën" van de bodemaggregaten bevindt zal niet aan het transport door de bodem deelnemen. Deze "micro-poriën" worden als "dead-end" poriën beschouwd.

In figuur 1 is een schema gegeven van de transportrelaties die bij het transport van CO_2 in de onverzadigde zone en wortelzone een rol kunnen spelen.

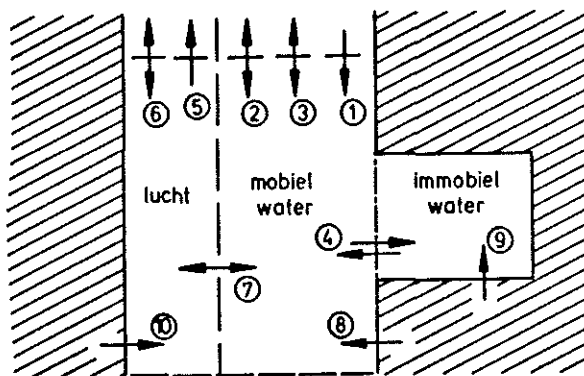


Fig. 1. Schema van het transport van CO_2 in de wortelzone en de onverzadigde zone

- 1) advectie in de mobiele waterfase
- 2) diffusie in de mobiele waterfase
- 3) hydronamische dispersie in de mobiele waterfase
- 4) diffusie van de mobiele naar de immobiele waterfase en vice versa.
- 5) advectie in de luchtfase
- 6) diffusie in de luchtfase
- 7) diffusie gas- <--> waterfase
- 8) produktie/consumptie in de mobiele waterfase
- 9) produktie/consumptie in de immobiele waterfase
- 10) produktie/consumptie in de luchtfase

Van de bovenstaande processen/evenwichten worden alleen 1), 3), 4), 6), 8) en 9) van belang geacht.

De diffusiecoëfficiënt van CO_2 -gas in de waterfase is $5 \cdot 10^{-5}$ tot 10^{-4} maal de diffusiecoëfficiënt van CO_2 -gas in de luchtfase. De diffusie van CO_2 in water is ten opzichte van de andere transportprocessen niet van belang. Proces 7) is niet van belang gezien de snelheid waarmee het evenwicht zich instelt.

De produktie/consumptie term 10) naar de luchtfase wordt niet van belang geacht, omdat in het verticale "macro-poriën" systeem wordt verondersteld dat de vaste fase en de luchtfase zijn gescheiden door een waterfilm.

Voor de algemene beschrijving van het transport van CO_2 in het verticale "macro-poriën" systeem kan de conserveringsvergelijking worden gebruikt:

$$\frac{\partial \text{CO}_{2T}}{\partial t} = - \text{div } J + Q_m + Q_i \quad (7)$$

met: CO_{2T} = totale hoeveelheid CO_2 in een bodemcompartiment
($\text{mol.l}^{-1}.\text{etm}^{-1}$)

J = totale CO_2 flux ($\text{mol.l}^{-1}.\text{etm}^{-1}$)

Q_m = positieve of negatieve produktie term mobiele waterfase
($\text{mol.l}^{-1}.\text{etm}^{-1}$)

Q_i = positieve of negatieve produktie term immobiele waterfase
($\text{mol.l}^{-1}.\text{etm}^{-1}$)

div = divergentie

De totale hoeveelheid CO_2 in het beschouwde bodemcompartiment is:

$$\text{CO}_{2T} = \theta_g [\text{CO}_2]_g + \theta_{wm} [\text{H}_2\text{CO}_3^*]_m + \theta_{wi} [\text{H}_2\text{CO}_3^*]_i \quad (8)$$

De CO_2 flux J van een compartiment naar een ander compartiment is te onderscheiden in:

$$J = J_{\text{adv}} + J_{\text{dis}} + J_{\text{difg}} \quad (9a)$$

advectieve flux in de mobiele waterfase:

$$J_{\text{adv}} = J_{wm} [\text{H}_2\text{CO}_3^*]_m \quad (9b1)$$

dispersieve flux in de mobiele waterfase:

$$J_{\text{dis}} = - \theta_{wm} D_{wm} \text{div} [\text{H}_2\text{CO}_3^*]_m \quad (9b2)$$

diffusieve flux in de luchtfase:

$$J_{\text{difg}} = - \theta_g D_g \text{div} [\text{CO}_2]_g \quad (9b3)$$

zodat:

$$J = J_w [H_2CO_3^*]_m - \theta_w D_w \operatorname{div} [H_2CO_3^*]_m - \theta_g D_g \operatorname{div} [CO_2]_g \quad (9c)$$

met: θ_g = volumegehalte gasfase (-)
 θ_{wm} = volumegehalte mobiele waterfase (-)
 θ_{wi} = volumegehalte immobiele waterfase (-)
 J_{wm} = flux van de mobiele waterfase ($m \cdot \text{etm}^{-1}$)
 D_{wm} = dispersiecoëfficiënt mobiele waterfase ($m^2 \cdot \text{etm}^{-1}$)
 D_{wi} = diffusiecoëfficiënt mobiele/immobiele waterfase ($m^2 \cdot \text{etm}^{-1}$)
 D_g = diffusiecoëfficiënt luchtfase ($m^2 \cdot \text{etm}^{-1}$)
 $[H_2CO_3^*]_m$ = concentratie $H_2CO_3^*$ in de mobiele waterfase ($\text{mol} \cdot l^{-1}$)
 $[H_2CO_3^*]_i$ = concentratie $H_2CO_3^*$ in de immobiele waterfase ($\text{mol} \cdot l^{-1}$)

Aangezien het verticale transport als één-dimensionaal wordt beschouwd, kan de divergentie worden geschreven als een gradiënt. De conserveringsvergelijking kan worden herschreven tot:

$$\frac{\partial \{ \theta_g [CO_2]_g + \theta_{wm} [H_2CO_3^*]_m + \theta_{wi} [H_2CO_3^*]_i \}}{\partial t} = - \frac{\partial \{ J_w [H_2CO_3^*]_m - \partial (D_w [H_2CO_3^*]_m) / \partial x - \partial (D_g [CO_2]_g) / \partial x \}}{\partial x} + Q_m \quad (10)$$

Binnen een tijdstap wordt het vochtgehalte van de immobiele waterfase θ_{wi} , de dispersiecoëfficiënt D_{wm} en de diffusiecoëfficiënt D_g constant verondersteld. De transportvergelijking wordt als volgt vereenvoudigd:

$$\frac{\partial (\theta_g [CO_2]_g)}{\partial t} + \frac{\partial (\theta_{wm} [H_2CO_3^*]_m)}{\partial t} + \theta_{wi} \frac{\partial [H_2CO_3^*]_i}{\partial t} = - \frac{\partial (J_w [H_2CO_3^*]_m)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (D_w \frac{\partial [H_2CO_3^*]_m}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (D_g \frac{\partial [CO_2]_g}{\partial x}) + Q_m \quad (11)$$

De uitwisseling tussen de mobiele en de immobiele fase wordt beschreven door (COATS and SMITH, 1964):

$$\theta_{wi} \frac{\partial [H_2CO_3^*]_i}{\partial t} = \alpha \{ [H_2CO_3^*]_m - [H_2CO_3^*]_i \} + Q_i \quad (12)$$

De produktie van CO_2 in de bodem uit de afbraak van organische stof is onder andere een funktie van de plaats, de temperatuur, de tijd en de totale hoeveelheid koolstof in het beschouwde bodemcompartiment. Deze produktieterm wordt berekend met het model ANIMO. De geproduceerde CO_2 wordt per tijdstap homogeen aan de waterfase van het systeem toegevoegd.

Volgens vergelijking (5) en vergelijking (6) bestaat er bij een gegeven temperatuur een vaste verhouding tussen $[CO_2]_g$ en $[H_2CO_3^*]$: $[CO_2]_g = a [H_2CO_3^*]$. Met behulp van deze uitdrukking kan $[CO_2]_g$ worden gesubstitueerd door $a [H_2CO_3^*]$.

De effectieve porositeit ϵ^* wordt gedefinieerd als de porositeit minus het immobiele vochtgehalte. Het luchtgehalte is dan de effectieve porositeit minus het mobiele vochtgehalte.

Voor de verandering van het luchtgehalte in de tijd op een bepaalde plaats in de bodem geldt:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial t} = - \frac{\partial \theta_m}{\partial t} \quad (13)$$

Substitutie van de uitdrukking $a [H_2CO_3^*]$ voor $[CO_2]_g$ en het invullen van de vergelijkingen (12) en (13) in vergelijking (11) levert na omwerken de volgende formulering op:

$$a \cdot \epsilon^* \frac{\partial [H_2CO_3^*]_m}{\partial t} + (1-a) \frac{\partial (\theta_{wm} [H_2CO_3^*]_m)}{\partial t} + \theta_{wi} \frac{\partial [H_2CO_3^*]_i}{\partial t} =$$

$$- \frac{(J_w [H_2CO_3^*]_m)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \{ (a \cdot D_g + D_w) \frac{\partial [H_2CO_3^*]_m}{\partial x} \} + Q_m \quad (15)$$

Deze vergelijking kan ook worden toegepast op stoffen zonder component in de gasfase door $a = 0$ te stellen.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\theta_{wm} [H_2CO_3^*]_m)}{\partial t} + \theta_{wi} \frac{\partial[H_2CO_3^*]}{\partial t} = - \frac{\partial(J_w [H_2CO_3^*]_m)}{\partial t} + \\ + \frac{\partial}{\partial x} (D_w \frac{\partial[H_2CO_3^*]_m}{\partial x}) + Q_m \end{aligned} \quad (15)$$

Het verwaarlozen van de immobiele fase ($\theta_{im} = 0$) heeft de partiële differentiaalvergelijking als resultaat die veelal als uitgangspunt wordt genomen bij de modellering van het stoftransport in de bodem, zie onder andere BRESLER (1973) en VAN DRECHT (1984).

Indien men in vergelijking (14) de concentratie van de waterfase naar 0 laat naderen en het verhoudingsgetal a oneindig groot stelt verkrijgt men de diffusievergelijking voor gassen.

$$\frac{\partial[CO_2]_g}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (D_g \frac{\partial[CO_2]_g}{\partial x}) + Q_m \quad (16)$$

De dispersiecoëfficiënt D_w wordt lineair evenredig met de reële snelheid u van de vloeistof op een bepaalde plaats in de bodem verondersteld. De dispersielengte λ is hierin een evenredigheidsfactor tussen D_w en u :

$$D_w = \lambda \cdot u \quad (17)$$

De diffusiecoëfficiënt D_g van CO_2 in de luchtfase van de bodem kan worden berekend als het produkt van de binaire diffusiecoëfficiënt D_o voor CO_2 in lucht en één of andere functie van het bodemluchtgehalte.

$$D_g = D_o f(\theta_g) \quad (18)$$

D_o kan als volgt worden berekend als (CAMPBELL, 1985):

$$D_o = 1,39 * 10^{-5} \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,75} \left(\frac{1}{p} \right) \quad (19)$$

Hierin is T de temperatuur in °K en p de druk in atm.

CURRIE (1965) geeft de volgende relatie voor de funktie $f(\theta_g)$:

$$f(\theta_g) = p_1 \theta_g^{p_2} \quad (20)$$

In de volgende tabel zijn een aantal waarden voor p_1 en p_2 weergegeven, zoals die in de literatuur vermeld staan. Voor een uitgebreid literatuuroverzicht wordt verwezen naar BAKKER (1987) en GLINSKI & STEPNIIEWSKI (1985). Voor niet gestructureerde zandgronden geeft BAKKER (1987) 0,75 en 2,5 à 3,2 als waarden voor p_1 en p_2 . Goede waarden voor deze parameters dienen te worden verkregen door calibratie van diffusiemodellen.

Tabel 1. Waarden voor de parameters p_1 en p_2

materiaal	θ_g range	p_1	p_2	referentie
aggregated Yolo silt loam	?	0,90	2,36	SALLAM et al. (1984)
Riverton soil ($1,4 < \rho_d < 1,8$)	?	0,92	1,70	ROGERS et.al. (1982)
Hamble silt loam	?	0,81	2,29	BALL (1981)
silt loam topsoils	0,02-0,4	0,49	1,5	GRADWELL (1961)
silty clay loam	0,15-0,43	5,25	3,36	GRABLE & SIEMER (1968)
nonpuddled topsoils	0,04-0,4	0,85	2,0	BAKKER & HIDDING (1970)
well structured soils	?	1.0	2,0	BAKKER & HIDDING (1970)

3.3. Numerieke oplossing van de transportvergelijking

De berekeningen van het stoftransport met vergelijking (14) in de bodem vinden volgens een eindig differentieschema plaats. De beschouwde bodemkolom wordt verdeeld in een aantal lagen met in het midden van iedere laag een knooppunt. De concentratieberekeningen vinden plaats voor ieder knooppunt.

De discretisatie van de plaats-afgeleiden vindt plaats volgens het Crank-Nicholson schema. De bepaling van de geïntroduceerde fouten door deze discretisatie kan worden benaderd met behulp van Taylor reeksen. De tijds-termen worden als volgt benaderd:

$$(1-a) \frac{\partial(c\theta)^{j+\frac{1}{2}}}{\partial t} = (1-a) \frac{\theta_i^{j+1} \cdot c_i^{j+1} - \theta_i^j \cdot c_i^j}{\Delta t} - (1-a) \frac{\Delta t u_i^{j+\frac{1}{2}}}{8 \Delta x^2} .$$

$$\{(\theta_i^{j+1} - \theta_i^j) \cdot [u_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \cdot (c_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} - c_i^{j+\frac{1}{2}}) - u_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \cdot (c_i^{j+\frac{1}{2}} - c_{i+1}^{j+\frac{1}{2}})]\} + \dots \quad (21)$$

$$a \cdot \epsilon^* \frac{\partial c^{j+\frac{1}{2}}}{\partial t} = a \cdot \epsilon^* \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t} - a \cdot \epsilon^* \frac{\Delta t (u_i^{j+\frac{1}{2}})^2}{\Delta x^2} .$$

$$\{c_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - 2c_i^{j+\frac{1}{2}} + c_{i-1}^{j+\frac{1}{2}}\} + \dots \quad (22)$$

De convectie-term:

$$-\frac{\partial(J_w \cdot c)}{\partial x} = -\frac{J_{w,i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \cdot IW_2 \{c_i^{j+\frac{1}{2}} - c_{i+1}^{j+\frac{1}{2}}\} - \frac{J_{w,i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \cdot IW_1 .$$

$$\{c_i^{j+\frac{1}{2}} - c_{i-1}^{j+\frac{1}{2}}\} + \dots \quad (23)$$

De diffusie- en dispersie term:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ (a \cdot D_g + D_m)^{j+\frac{1}{2}} \frac{\partial c}{\partial x} \right\} &= \frac{(a \cdot D_g + D_m)^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} (c_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - c_i^{j+\frac{1}{2}}) - \\ &- \frac{(a \cdot D_g + D_m)^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} (c_i^{j+\frac{1}{2}} - c_{i-1}^{j+\frac{1}{2}}) + \dots \end{aligned} \quad (24)$$

De term die de uitwisseling met de immobiele fase beschrijft:

$$\frac{\partial c_{im}}{\partial t} = \frac{c_{im,i}^{j+1} - c_{im,i}^j}{\Delta t} = \frac{\alpha}{\theta_{im}} (c_i^{j+\frac{1}{2}} - c_{im}^{j+\frac{1}{2}}) \quad (25)$$

Hierin is c_i^j de concentratie en $c_i^{j+\frac{1}{2}}$ de tijds-gecentreerde concentratie van $H_2CO_3^*$ op een knooppunt dat is gelegen in het midden van laag i . De gemiddelde concentratie halverwege een tijdstap wordt berekend als het gemiddelde van de oude en de nieuwe concentratie. De diffusie en de oplosbaarheidsfactoren zijn temperatuursafhankelijk en worden voor de situatie halverwege de tijdstap op de grensvlakken tussen de lagen berekend.

IW is een werkingsfactor, met $IW = 0$ als water over het grensvlak uit de laag naar een buurlaag stroomt en $IW = 1$ als er sprake is van instroming uit de buurlaag.

De waterflux wordt gedurende de tijdstap constant verondersteld. De vochtgehalten zijn bekend voor het begin en het einde van de tijdstap. De geïntroduceerde numerieke dispersie wordt van de natuurlijke diffusie en dispersie, zoals berekend met vergelijking (17) en vergelijking (18), afgetrokken.

De veranderingen in vochtgehalten en fluxen (opwaartse en neerwaartse fluxen) veroorzaken een extra natuurlijke-dispersie, ten opzichte van de dispersie in de stationaire stromingssituatie, die niet goed te kwantificeren is.

De bepaling van de numerieke dispersie vormt slechts een benadering omdat de veranderingen in vochtgehalten en fluxen per tijdstap slechts gedeeltelijk in de berekeningen van de geïntroduceerde fouten worden

betrokken. De grootte van de tijdstap en de laagdikte vormen de grootheden waarmee deze fouten in de hand kunnen worden gehouden. Het gebruik van het Crank-Nicholson schema heeft als voordeel dat in de stationaire stromingssituaties de numerieke oplossing redelijk stabiel is. Aangezien hier met niet-stationaire stromingssituaties wordt gerekend, moet worden getest of per tijdstap de waterverversing van een laag door water vanuit een buur-laag niet te groot is. Indien dit wel het geval is (tijdstap groter dan de minimale verblijftijd) dient de tijdstap kleiner te worden gekozen.

De berekening van de concentraties voor een tijdstap geschiedt door het opstellen van een vergelijking met 3 onbekenden c_{i+1}^{j+1} , c_i^{j+1} , c_{i-1}^{j+1} voor iedere bodemlaag. Dit stelsel vergelijkingen (drie-band matrix) wordt met behulp van een Thomas-algorithme opgelost.

De laterale water- en stoffluxen kunnen worden berekend als resttermen uit de balansberekeningen.

4. PRODUKTIE EN CONSUMPTIE VAN CO_2 EN H^+

4.1. De produktie van CO_2 in de bodem

De berekening van de koolstofproduktie kan worden uitgevoerd met het model ANIMO (BERGHUIJS VAN DIJK et.al., 1985). Dit model heeft de simulatie van de stikstofhuishouding als doel, maar het geeft tevens een goed gedetailleerde beschrijving van de organische stofhuishouding. Figuur 2 geeft een schema van de organische stofkringloop zoals die is gemodelleerd in ANIMO.

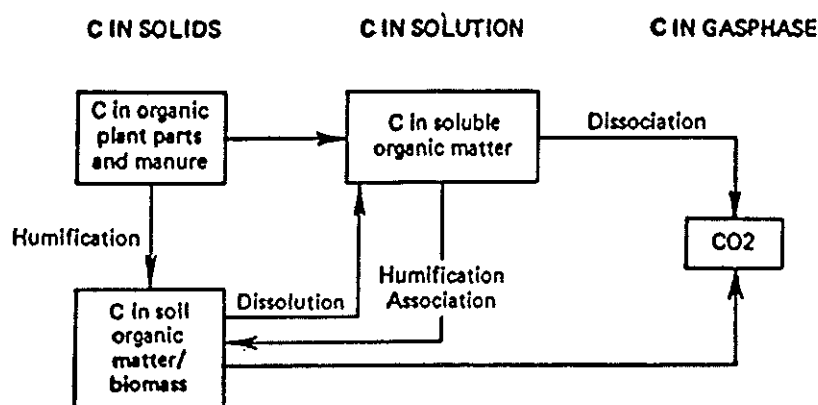


Fig. 2. De organische stof kringloop zoals deze is gemodelleerd in het model ANIMO; naar BERGHUIJS-VAN DIJK et.al.(1985)

Bij de koolstof- en stikstofhuishouding spelen verschillende substraten van organische stof een rol. In het model ANIMO worden de volgende soorten onderscheiden:

- 1) vers organisch materiaal; de wortel- en bovengrondse delen van de plant die na de oogst of het afsterven in de bodem terecht komen. Ook de organische delen van mest kunnen een input aan vers organisch materiaal geven.
- 2) wortellexudaten; organische produkten en dode cellen die bij de plantengroei worden uitgescheiden.
- 3) humus; humus kan in verschillende soorten in de bodem voorkomen. De soorten kunnen worden onderscheiden naar stabiliteit en herkomst.
- 4) organisch materiaal in oplossing; de transformatie naar andere soorten organisch materiaal gaat gedeeltelijk via de opgeloste fase.

De organische stofproduktie in de bodem wordt berekend aan de hand van de wortelgroei van het gewas of de vegetatie. De ontwikkelings- en groeikarakteristiek van het beschouwde gewas of de beschouwde vegetatie wordt door de gebruiker zelf in het model ingevoerd. Voor een aantal gewassen zijn de parameters uit de literatuur bepaald en als standaard beschikbaar.

Tevens bevat het model ANIMO een gewasproductiemodule voor grasland. De produktie van organische stof in de bodem wordt in deze module berekend als een funktie van de bovengrondse produktie, het eventuele maai- en graasregiem, de waterhuishouding, de bemesting etc.

De natuurlijke vegetatie van een blauwgrasland kan worden beschouwd als een onbeweid en onbemest laag-produktief grasland.

Bij de afbraak van organische stof en een aantal omzettingen kan CO_2 vrijkomen. De verhouding tussen de hoeveelheid gevormd organisch materiaal en de afgebroken hoeveelheid vers organisch materiaal wordt de assimilatiefactor genoemd.

Voor de omrekening van de vrijgekomen hoeveelheid organische stof naar elementair koolstof wordt een factor 0,58 gebruikt.

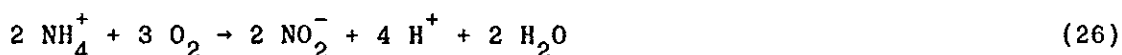
Een andere CO_2 -bron vormt de wortelrespiratie. Tot nu toe is deze term nog niet gemodelleerd in het model ANIMO. De wortelrespiratie kan sterk variëren voor verschillende vegetaties en groeistadia. De orde van grootte van deze wortelrespiratieterm voor natuurlijk onbemest grasland bedraagt 5-10% van de totale koolstofstroom naar de wortels (SAUER, 1978). In de stationaire situatie is deze term op jaarbasis te verwaarlozen gezien de onzekerheden in de schattingen van de andere parameters.

Een eventuele beïnvloeding van de totale hoeveelheid CO_2 in een bodemcompartiment op de afbraak van organische stof door veranderingen in de zuurgraad wordt in dit model nog niet in beschouwing genomen.

4.2. De produktie en consumptie van H^+ als gevolg van nitrificatie en denitrificatie

Een bepaald gedeelte van organische stof bestaat uit stikstof, dat bij de mineralisatie vrijkomt als NH_4^+ . Dit NH_4^+ kan afkomstig zijn van opgeloste organische stof en stabielere soorten organische stof. Bij

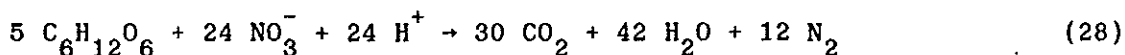
de nitrificatie wordt in aanwezigheid van zuurstof ammonium omgezet in nitraat. Het proces vindt plaats in 2 stappen, waarbij meerdere soorten micro-organismen een rol spelen.



Ieder ammoniumion dat wordt omgezet in nitraat levert volgens deze vergelijking 2 waterstofionen.

Dit proces is in ANIMO geformuleerd als een eerste orde reactie en is afhankelijk van de hoeveelheid in de oplossing beschikbare ammonium. Onder anaerobe omstandigheden kan in afwezigheid van O_2 afbraak van organische stof plaats vinden met behulp van de zuurstof van nitraationen. Deze omzetting vindt eveneens plaats indien de zuurstofvraag bij de beschouwde processen groter is dan het mogelijke aanbod. De mogelijke toevoer van zuurstof wordt berekend uit de gasdiffusievergelijking.

De omzetting van glucose met behulp van NO_3^- tot CO_2 en N_2 door *Pseudomonas aeruginosa* wordt in het model ANIMO als de belangrijkste denitrificatiereactie beschouwd:



Deze reactie is zuurconsumerend. Voor ieder nitraation dat wordt omgezet tot stikstof wordt 1 waterstofion gebruikt.

De hoeveelheid nitraat die in de bodem kan denitrificeren wordt sterk gereguleerd door de C-kringloop. In het model ANIMO wordt deze reactie beschreven als een nulde orde proces.

Nitraat dat boven in het profiel bij de nitrificatie wordt gevormd, kan nadat het naar diepere bodemlagen is uitgespoeld, onder anaërobe omstandigheden denitrificeren.

Het verlagen van de grondwaterstand in een bodemprofiel maakt een betere aeratie van het profiel mogelijk. Dit heeft vaak effecten op de stikstofleverantie vanuit de mineralisatie van organische stof. Behalve deze effecten kan door de verbeterde aërobe omstandigheden ook een extra hoeveelheid zuur worden geproduceerd waar tot voor de grondwaterstandsverlaging zuur werd geconsumeerd.

5. KOPPELING AAN HET MODEL EPIDIM

De anorganische koolstofhuishouding is een belangrijke sturende factor in het scala van de standplaatsfactoren. De stikstof- en fosfaathuishouding wordt in belangrijke mate beïnvloed door de zuurgraad van het bodemwater.

CO_2 kan in de waterfase betrokken zijn bij verschillende chemische evenwichten. CO_2 dat in water oplost vormt een potentiële zuurbron. De verwerking van carbonaatmineralen is zuurconsumerend. H^+ kan in mindere of meerdere mate worden gebonden aan een adsorptiecomplex. Bij de modellering van het gedrag van CO_2 en H^+ is daarom aandacht besteed aan de beschrijving van chemische evenwichten en het adsorptiemechanisme in het model EPIDIM (GROENENDIJK, 1987).

In figuur 3 zijn de mogelijke verschijningsvormen van anorganisch zuur en anorganisch koolstof en hun onderlinge reacties zoals die zijn gemodelleerd in het model EPIDIM 1987) schematisch weergegeven.

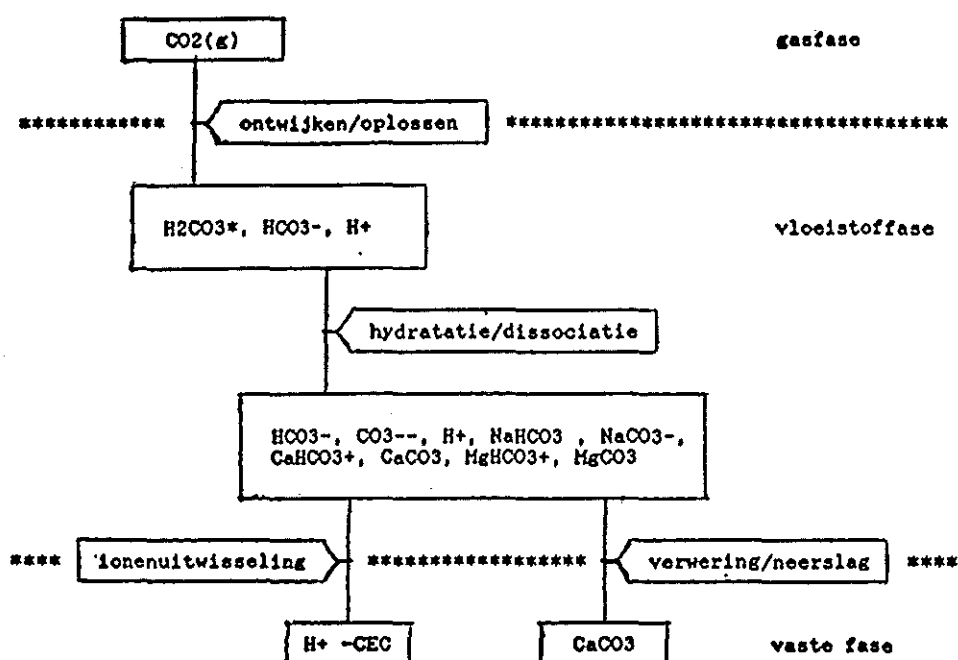


Fig.3. Schema van de verschijningsvormen van H^+ en CO_2 en de mogelijke chemische reacties

Een uitgangspunt bij de modellering is de aanname dat het gedeelte van de bodem dat wordt voorgesteld als de effectieve porositeit (luchtfase + mobiele waterfase) een open systeem is en dat het immobiele gedeelte een gesloten systeem is. In het open systeem wordt een gefixeerde CO_2 spanning aan het systeem opgelegd. Indien verwerking van mineralen of neerslag niet in beschouwing wordt genomen heeft het bovenstaande uitgangspunt de consequentie dat de concentratie van CO_2 bij de evenwichtsberekeningen gelijk blijft en dat de totale hoeveelheid anorganisch koolstof en de hoeveelheid protonen kan toe- of afnemen.

In het gesloten systeem blijven de totaalbalansen gelijk en kan de CO_2 -concentratie verschuiven.

De koppeling met de evenwichtsberekeningen vindt plaats volgens de zogenaamde twee-stap methode (GROENENDIJK, 1987). Na een bepaalde transporttijdstep worden de totaalbalansen van de verschillende componenten als invoerinformatie voor het chemische evenwichtssysteem gebruikt, alsmede de temperatuur en het vochtgehalte van de mobiele fase.

In het model wordt CO_2 getransporteerd volgens het transportsysteem dat wordt beschreven door vergelijking (14). De totale hoeveelheid anorganisch koolstof minus CO_2 en de totale hoeveelheid H^+ minus CO_2 worden evenals de hoeveelheden Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} in oplossing en Cl^- en SO_4^{--} getransporteerd volgens het systeem dat wordt beschreven door vergelijking (15).

Bij de berekening van de evenwichten (na iedere tijdstap) wordt de hoeveelheid CO_2 aan de totaalbalansen van anorganisch koolstof en H^+ toegevoegd. Eveneens wordt de met ANIMO berekende H^+ produktie en consumptie term met de H^+ balans verrekend.

In figuur 4 wordt de manier en de volgorde waarin de berekeningen worden uitgevoerd schematisch in een stroomdiagram weergegeven.

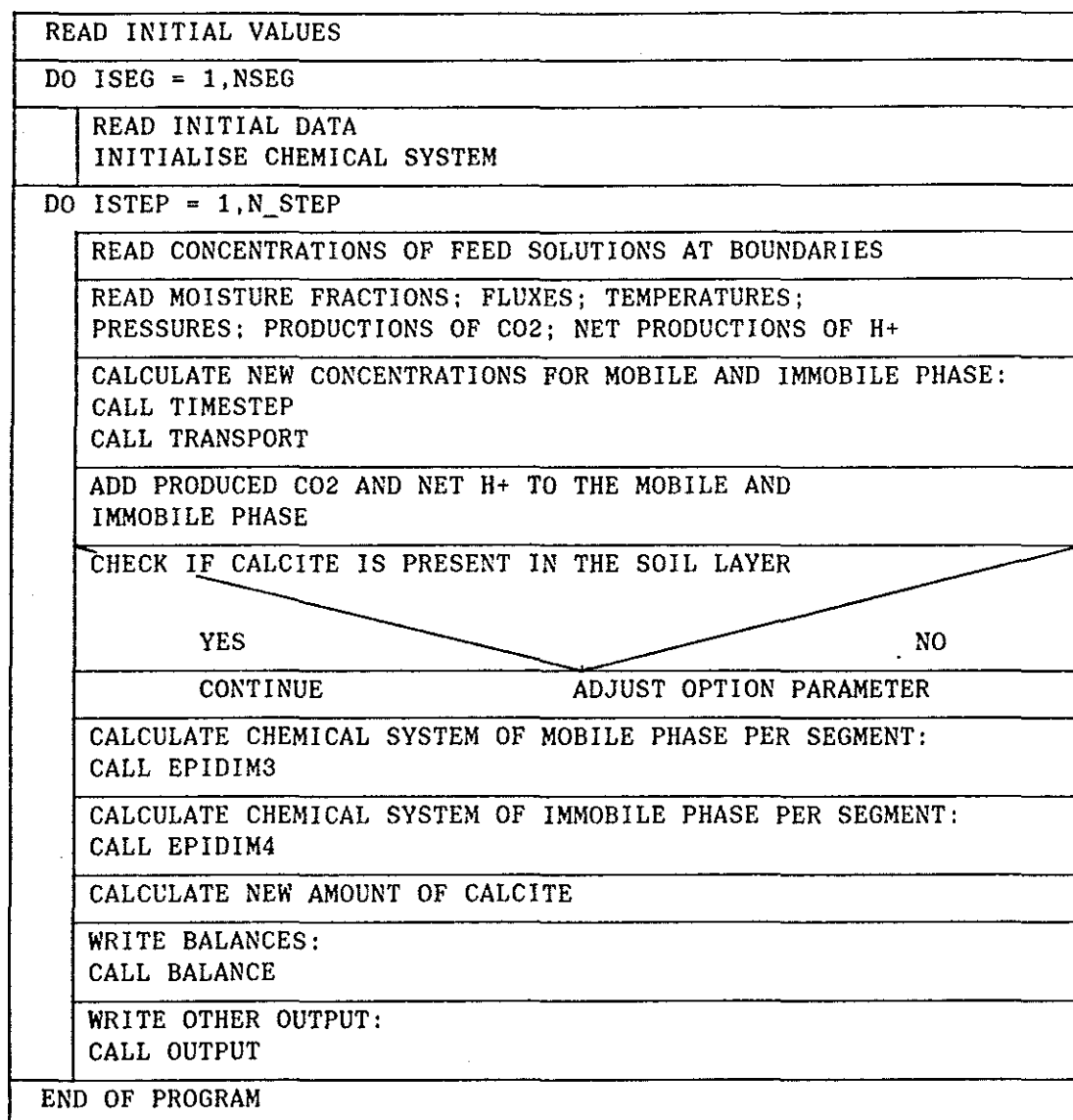


Fig. 4. Stroomschema van de gekoppelde stoftransport/productie/chemische evenwichtsberekeningen

6. RESULTATEN

6.1. Simulaties met het model WATBAL/BALANCE en SWATRE

6.1.1. Vocht- en luchtprofielen in de Tondense heide

Voor de jaren 1975 tot en met 1986 is de waterbalans van de onverzadigde zone doorgerekend voor een veldpodzol in de Tondense heide. De invoer van WATBAL die hiervoor gebruikt is staat vermeld in appendix 1. Ten aanzien van de gebruikte parameterwaarden kunnen nog enkele opmerkingen worden gemaakt.

- De gewasreductiefactor is gedurende het gehele jaar constant 0,60 verondersteld.
- De bedekkingsgraad van het bodemoppervlak varieert van 50% in de winter tot 100% in de zomer.
- De dikte van de wortelzone is op 20 cm gesteld.
- De vochtfracties bij verzadigingspunt, 'veldcapaciteit' en 'verwelkingspunt' van de wortelzone en de ondergrond bedragen respectievelijk 0,44, 0,34, 0,10 en 0,28, 0,24, 0,03.
- De capillaire opstijghoogte is gelijk gesteld aan 90 cm.
- Er zijn twee verschillende drainageniveaus onderscheiden.
- Er bleek een goede correlatie te bestaan tussen de gemeten grondwaterstanden in de veldpodzolbuis en een landbouwbuis uit het meetnet van TNO. De grondwaterstand in deze landbouwbuis is in de loop der jaren veelvuldig opgenomen. Hierdoor werd het mogelijk via extrapolatie een volledige reeks grondwaterstanden op decadebasis tot stand te brengen voor de veldpodzolbuis. Deze reeks is, gecombineerd met gemeten waarden (VAN DEN TOORN & PANKOW, 1987) als invoer voor de simulaties gebruikt.
- De gebruikte neerslaggegevens zijn afkomstig van regenstation Eerbeek.
- Voor de verdampingscijfers zijn de gemiddelden tussen weerstation De Bilt en Winterswijk gebruikt.

De voor SWATRE gebruikte invoer ter berekening van de waterbalans van de onverzadigde zone in de Tondense heide voor het jaar 1986 staat vermeld in appendix 2.

Bij deze invoer zijn nog enkele kanttekeningen te maken.

- De gewasreductiefactor is constant op 0,60 gesteld.
- De bedekkingsgraad van de bodem varieert van 50% in de winter tot 100% in de zomer.
- De dikte van de wortelzone bedraagt 20 cm.
- De gebruikte pF-curves en k- θ relaties zijn ontleend aan HENDRIKS (1986).
- De gebruikte, op dagbasis gebaseerde, neerslaggegevens zijn afkomstig van regenstation Eerbeek.
- De gebruikte, op decadebasis gebaseerde, verdampingscijfers zijn de gemiddelden van de weerstations De Bilt en Winterswijk.
- De met WATBAL berekende afvoeren zijn gebruikt in een curvefitting procedure om voor de Tondense heide, c.q. de veldpodzol locatie, een relatie te vinden tussen de afvoer en de grondwaterstandsdiepte. Dit is gedaan omdat het gebruik van één van de exponentiele Q-h relaties, zoals die worden gegeven door ERNST & PEDDES (1979), niet op meetgegevens kan worden gebaseerd.

In deze curvefitting procedure zijn de afvoeren en grondwaterstanden gebruikt van de jaren 1975 tot en met 1984. Deze afvoeren en grondwaterstanden staan op decadebasis grafisch weergegeven in figuur 5, tezamen met de hieruit berekende afvoer-grondwaterstand relatie.

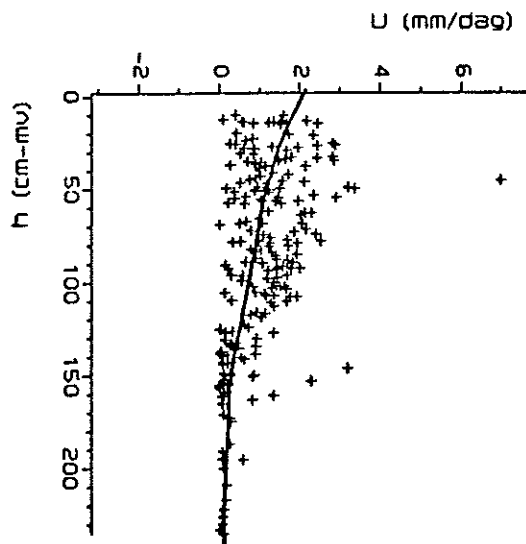


Fig. 5. Met WATBAL berekende afvoeren (*) uitgezet tegen grondwaterstanden en de hieruit berekende afvoer-grondwaterstand relatie

Hieruit blijkt dat de gefitte exponentiële functie niet erg mooi door de puntenwolk loopt. Afhankelijk van de hydrologische voorgeschiedenis en de meteorologische omstandigheden in een specifiek jaar kunnen de waarden van de parameters in een dergelijke relatie variëren.

De reeks afvoeren en grondwaterstanden die in figuur 5 zijn weergegeven zijn gebruikt om dergelijke relaties op jaarbasis op te stellen. In tabel 2 staan op jaarbasis de berekende parameterwaarden voor de afvoer-grondwaterstand relaties en de bijbehorende correlatiecoëfficiënten voor de veldpodzollocatie in de Tondense heide. De correlatiecoëfficiënten hebben betrekking op de relatie:

$$\log(Q) = \log(a) + b * h$$

Tabel 2. Op jaarbasis berekende parameterwaarden voor de afvoer - grondwaterstandrelaties en de bijbehorende correlatie coëfficiënten voor de veldpodzollocatie in de Tondense heide

jaar	a	b	R ₂
1975	1,5836	-0,01183	-0,44
1976	5,0774	-0,01703	-0,81
1977	3,1352	-0,01769	-0,60
1978	2,1075	-0,01366	-0,49
1979	2,8534	-0,01870	-0,68
1980	1,1007	-0,01712	-0,08
1981	1,3273	-0,02897	-0,18
1982	2,5633	-0,01729	-0,69
1983	3,5796	-0,01680	-0,50

De regionale effecten van kwel kunnen voor deze standplaats per jaar variëren. Het opstellen van een eenduidige afvoer-grondwaterstand relatie is voor deze locatie niet zinvol aangezien men te maken heeft met een puntenwolk met een grote spreiding, waarbij men te maken heeft met zowel positieve als negatieve Q-waarden bij dezelfde grondwaterstand. Desalniettemin is het wel mogelijk om op jaarbasis een afvoer-grondwaterstands relatie te schatten die kan worden gebruikt als invoer voor SWATRE.

De geschatte afvoer-grondwaterstands relatie voor het jaar 1986 luidt:

$$Q = -0,1950 * e^{-0,0167 * h} \quad (29)$$

waarbij: Q = afvoer ($\text{cm} \cdot \text{dag}^{-1}$)

h = grondwaterstand (cm-maaiveld)

In figuur 6 zijn de gemeten grondwaterstanden en de door SWATRE berekende grondwaterstanden voor het jaar 1986 weergegeven. Hieruit blijkt duidelijk dat de als invoer gebruikte afvoer-grondwaterstand relatie in dit geval goed functioneert.

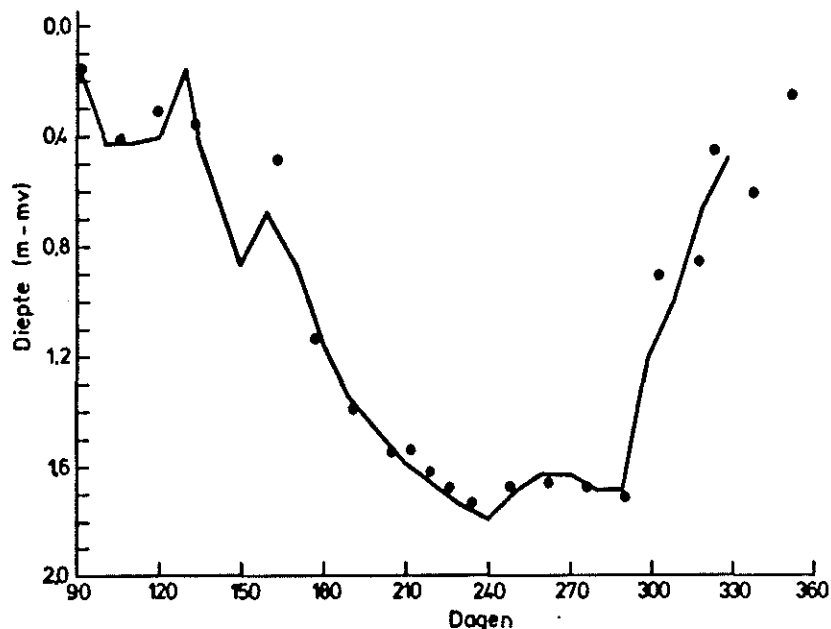


Fig. 6. Gemeten grondwaterstanden (•) en het met behulp van SWATRE berekende grondwaterstandsverloop in de Tondense heide voor het jaar 1986

Samenvattend kan gesteld worden dat de uitgevoerde simulaties met beide modellen gebaseerd zijn op dezelfde weergegevens, dat de berekende afvoeren min of meer identiek zijn en de ingevoerde en berekende grondwaterstanden voor beide modellen eenzelfde verloop vertonen. Dit betekent dat de berekende verdampingsfluxen in beide modellen eveneens niet al te veel van elkaar mogen afwijken. Dit kan gecontroleerd worden door het vochttekort uit te rekenen. Onder het vochttekort wordt verstaan het in het groeiseizoen cumulatief opgetelde verschil tussen

de potentiële en actueel plaats vindende verdamping (DEN BESTEN, 1986). In totaal bedraagt het op deze wijze berekende vochttekort voor 1986 in de Tondense heide (locatie veldpodzol) 52,0 mm volgens de simulaties met WATBAL en 41,0 mm volgens de simulaties met SWATRE. Overeenkomstig uitgevoerde berekeningen voor het jaar 1985 leverden met behulp van WATBAL en SWATRE geen noemenswaardig vochttekort op. De met behulp van WATBAL en SWATRE berekende waterbalansen voor de onverzadigde zone in de Tondense heide vertonen al met al redelijke gelijkenis. Dit is een voorwaarde wil een vergelijking tussen de met behulp van WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende vocht/luchtprofielen zinvol zijn.

Voor verschillende dagen in 1986 zijn de berekende vocht/luchtprofielen uitgezet in figuur 7.

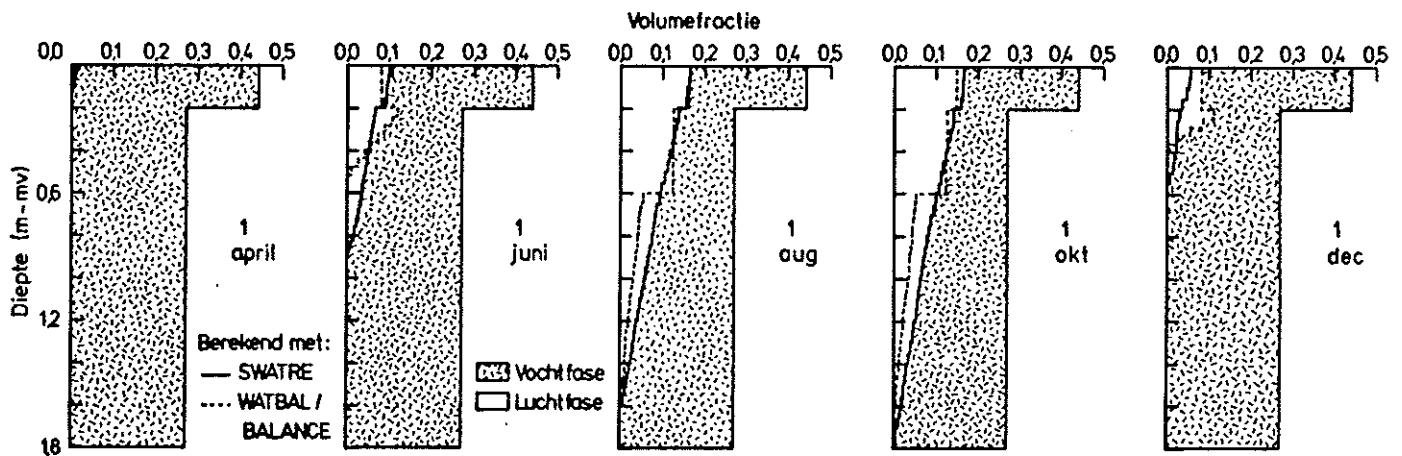


Fig. 7. Berekende vocht/luchtprofielen voor enkele dagen in 1986 voor de veldpodzol in de Tondense heide

Bij vergelijking van de door WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende vocht/luchtprofielen valt op dat de, in de WATBAL/BALANCE schematisatie aangenomen uniforme verdeling van bodemvocht (en dus lucht) in de wortelzone en ondergrond (bij uitdroging tot het 'verwelkingspunt', bijvoorbeeld 1 augustus en 1 oktober), tot de grootste afwijkingen leidt ten opzichte van de door SWATRE berekende profielen. In het geheel genomen vertonen de door WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende profielen echter een grote mate van gelijkenis.

6.1.2. Vocht- en luchtprofielen in Groot Zandbrink

Voor de beekeerdgronden in Groot Zandbrink is de waterbalans van de onverzadigde zone voor de jaren 1985 en 1986 en voor de jaren 1979 tot en met 1981 doorgerekend. In de periode 1979-1981 zijn er in het veld verscheidene bodemvochtbepalingen verricht met behulp van de gamma-transmissiemethode (JANSEN & KEMMERS, 1980). Hierdoor werd het mogelijk om de door WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende vochtprofielen te vergelijken met in het veld gemeten waarden.

De invoer die gebruikt is voor de WATBAL/BALANCE simulaties ter berekening van de vocht- en luchtprofielen in Groot Zandbrink staan vermeld in appendix 1.

Ten aanzien van deze gegevens kunnen er nog enkele opmerkingen gemaakt worden:

- De gewasreductiefactor voor de winterperiode (1 oktober - 1 april) bedraagt 0,80, voor de zomerperiode (1 april - 1 oktober) 0,65.
- De bedekkingsgraad is constant 100% verondersteld.
- De vochtfracties bij verzadigingspunt, 'veldcapaciteit' en 'verwelkingspunt' van de wortelzone (dikte 10 cm) en ondergrond bedragen respectievelijk 0,63, 0,57, 0,50 en 0,36, 0,32, 0,28.
- De capillaire opstijghoogte is op 60 cm gesteld.
- Een volledige reeks grondwaterstanden op decadebasis is verkregen door interpolatie tussen de (meestal 1 à 2-wekelijks) gemeten waarden (zie JANSEN & KEMMERS, 1980).
- Er worden 2 drainageniveau's onderscheiden, namelijk het kwel/wegzijgingssysteem en een 3 meter verder gelegen greppel.
- De gebruikte neerslagcijfers zijn afkomstig van weerstation Woudenberg.
- De gebruikte verdampingscijfers zijn afkomstig van weerstation De Bilt.
- Per jaar staat de genoemde standplaats in Groot Zandbrink gedurende circa 4 maanden onder water. De simulaties met SWATRE konden alleen voor de circa 8 maanden dat de grondwaterstand zich beneden maaiveld bevindt worden uitgevoerd.

De voor SWATRE gebruikte invoer staat vermeld in appendix 2. Bij deze parameterwaarden kunnen nog enkele opmerkingen gemaakt worden:

- De gewasreductiefactor voor de periode 1 oktober - 1 april bedraagt 0,80, voor de periode 1 april - 1 oktober 0,65.
- De bedekkingsgraad van het bodemoppervlak is constant 100% verondersteld.
- De dikte van de wortelzone bedraagt 10 cm.
- De gebruikte pF-curves en k- θ relaties staan weergegeven in appendix 2.
- Een volledige reeks grondwaterstanden op dagbasis is tot stand gekomen door interpolatie tussen de (meestal 1 à 2-wekelijks) gemeten waarden (JANSEN & KEMMERS, 1980).
- De gebruikte neerslaggegevens zijn afkomstig van weerstation Woudenberg, de gebruikte verdampingscijfers van station De Bilt.

De simulaties met WATBAL en SWATRE zijn uitgevoerd met dezelfde weergegevens en grondwaterstanden. Indien de berekende actuele verdamping in beide modellen min of meer overeenkomen dan zullen de berekende totaal af(aan-)voeren dat eveneens doen.

In figuur 8 zijn voor de beekerdgrond de potentiële verdamping ($f \cdot E_0$), tezamen met de door WATBAL en SWATRE berekende actuele verdamping, weergegeven voor het groeiseizoen 1986.

Uit deze figuur valt af te leiden dat gedurende de zomer een aanzienlijke verdampingsreductie is opgetreden. Het met behulp van de WATBAL simulaties berekende vochttekort voor 1986 bedraagt 59,7 mm, het met behulp van SWATRE berekende vochttekort 55,5 mm. Dit ligt in dezelfde orde van grootte.

Voor verschillende dagen uit het jaar 1981 zijn de op verschillende dieptes gemeten vochtgehalten weergegeven tezamen met de door WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende vochtprofielen (figuur 9).

Hieruit blijkt dat, zowel de met behulp van WATBAL/BALANCE en SWATRE berekende profielen goed door de gemeten waarden lopen. Tevens valt uit deze figuur af te leiden dat de betreffende beekerdgronden gedurende het gehele jaar relatief erg vochtig blijven. Er is eigenlijk geen sprake van een echt sterke uitdrogingsfase gedurende de zomerperiode. Dit is onder andere het gevolg van het feit dat deze beekerdgronden gedurende een groot gedeelte van het jaar onder invloed staan van kwel.

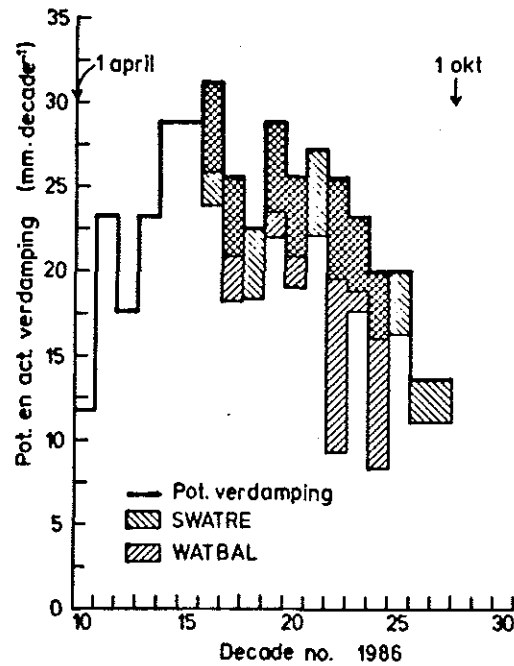


Fig. 8. Het vochttekort in Groot Zandbrink gedurende het jaar 1986 berekend met behulp van WATBAL en SWATRE. Cumulatief bedraagt het vochttekort in het groeiseizoen van 1986 volgens WATBAL 59,7 mm en volgens SWATRE 55,5 mm

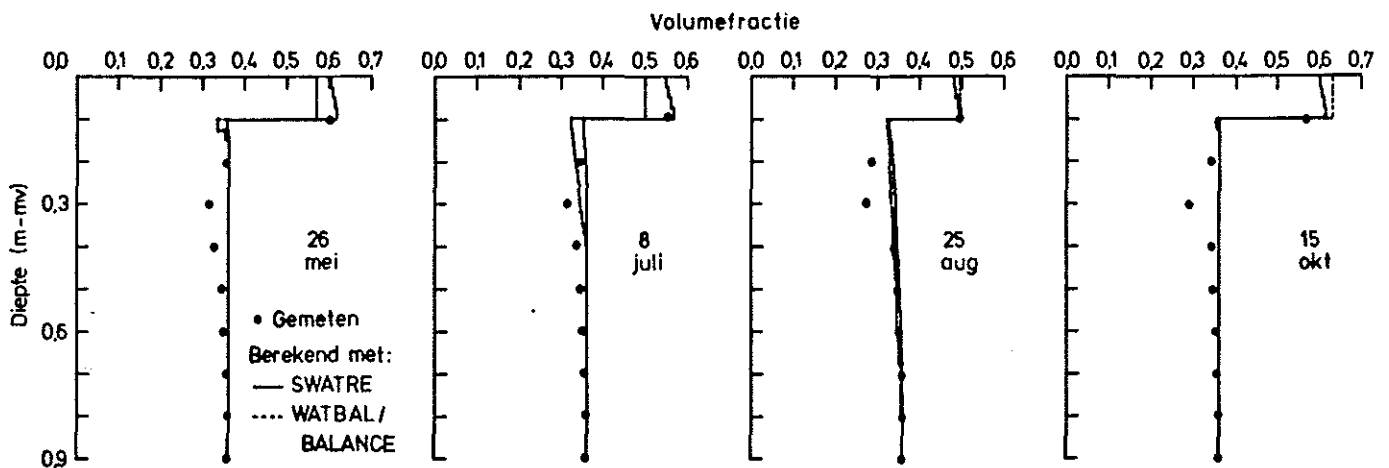


Fig. 9. Gemeten vochtgehalten (•) en berekende vochtprofielen voor enkele dagen in 1981 voor de beekeerdgrond in Groot Zandbrink

In figuur 10 zijn, voor enkele dagen in 1986, berekende vocht/luchtprofielen voor de beekeerdgrond weergegeven.

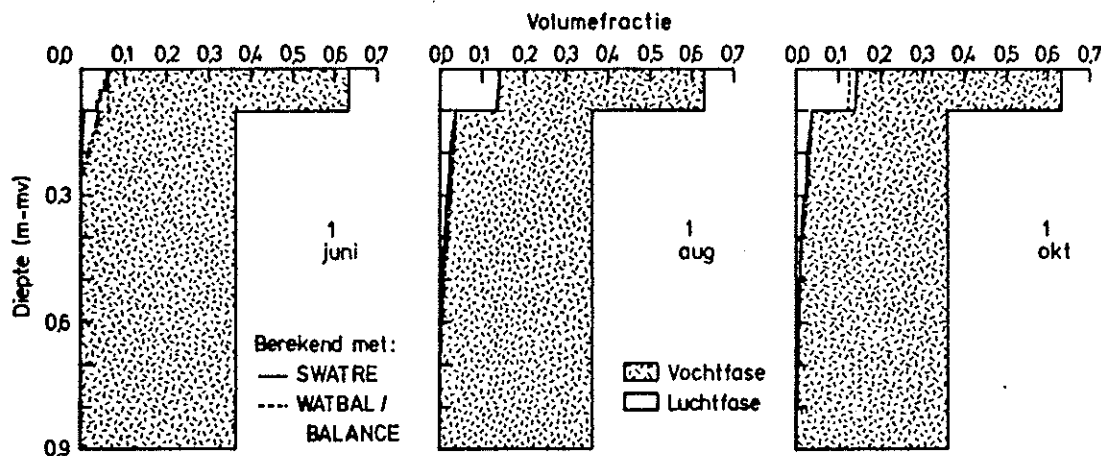


Fig. 10. Berekende vocht/luchtprofielen voor enkele dagen in 1986 voor de beekeerdgrond in Groot Zandbrink

Deze profielen vertonen onderling een grote mate van gelijkenis en wijken niet noemenswaardig af van de voor het jaar 1981 gepresenteerde profielen.

6.1.3. Opmerkingen

De in hoofdstuk 6.1.1 en 6.1.2 vermelde resultaten zijn tot stand gekomen na een reeks van berekeningen en even zovele aanpassingen in de invoerfiles die vermeld staan in appendices 1 en 2. Dit is het gevolg van het feit dat niet alle invoerparameters direct eenduidig kwantitatief te karakteriseren zijn voor de betreffende gebieden. Wil het tot een juiste afstemming van waarden van de verschillende parameters in een invoerfile komen dan is het allereerst noodzakelijk af te tasten hoe sterk bepaalde parameters in feite de uitvoer van de berekeningen bepalen. Naarmate de invloed van een dergelijke parameter groter is, is het des te belangrijker deze zo exact mogelijk te kwantificeren. De in het kader van deze studie uitgevoerde berekeningen hebben in ieder geval het volgende duidelijk gemaakt:

WATBAL

- Het blijkt dat het vochtgehalte bij 'verwelkingspunt' en 'veldcapaciteit' niet per definitie gelijk hoeft te zijn aan het vochtgehalte bij een pF-waarde van, respectievelijk, 4,2 en 2,0. Afhankelijk van de pF-curve en vooral afhankelijk van de bijbehorende k- θ relatie kunnen hiervoor andere waarden worden gebruikt. In de in deze studie onderscheiden bodemlagen in de Tondense heide en Groot Zandbrink is verondersteld dat het vochtgehalte bij 'verwelkingspunt' daar ligt waar de onverzadigde doorlatendheid circa 0,1 à 1,0 cm/etm bedraagt. Een dergelijke kleine doorlatendheid draagt in het algemeen niet meer significant bij tot veranderingen in het het algehele stromingsbeeld. De pF-curve van de ondergrond van het Groot Zandbrink-profiel vertoont een sterke stoelvorm. Een kleine variatie in de zuigspanning resulteert in een grote verandering in het vochtgehalte.

Voor de simulatie van de luchthuishouding met het model WATBAL moeten bij de toepassing in natte gebieden de bovengenoemde grootheden kritisch worden gekozen. De uitkomsten van de meeste luchtdiffusie modellen zijn namelijk bijzonder gevoelig voor het luchtgevulde poriënvolume. Waarschijnlijk kunnen de pF waarden waarbij in het model WATBAL sprake is van veldcapaciteit, worden gerelateerd aan bodemkundige omstandigheden en grondwatertrappen.

- De invloed die de totaliteit van de verschillende drainage systemen op de water- en luchthuishouding in de bodem uitoefent is gecompliceerd. Kleine veranderingen in de gemodelleerde drainage systemen kunnen soms resulteren in moeilijk voorspelbare gevolgen.
- Indien echter het drainage systeem goed is beschreven in de modelinvoer voor WATBAL, levert het meer-dimensionale karakter van de berekeningen waarschijnlijk resultaten met een grotere realiteitswaarde dan één-dimensionale berekeningen.
- Het model WATBAL leent zich door zijn drainage formulering ook beter voor het doorrekenen van peilbeheer scenario's.
- De schatting van een reële waarde voor de capillaire opstijghoogte is belangrijk in verband met de invloed die het vochtनावerend vermogen heeft op de water- en luchthuishouding.

- Het is belangrijk de dikte van de wortelzone nauwkeurig te definiëren in verband met de grote invloed die deze uitoefent op de te berekenen verdampingsflux en diensgevolge op het algehele stromingsbeeld in de bodem.

SWATRE

- Het is belangrijk te weten hoeveel getallenparen van de gebruikte pF-curve en $k-\theta$ relatie in feite meetpunten zijn en hoe hier tussen is geïnterpoleerd. Een relatief kleine verandering in het traject 0-100 cm zuigspanning kan resulteren in relatief grote veranderingen in de berekende vocht- en luchtprofielen.
- In gebieden waar gedurende een gedeelte van het jaar de grondwater-spiegel boven het maaiveld staat kan SWATRE de water- en luchthuishouding in de onverzadigde zone alleen berekenen in de periodes waarin dit niet het geval is.
- Bij gebruik van Q-h relaties in SWATRE berekeningen op perceelsniveau in een hellend gebied dient gerealiseerd te worden dat de relaties niet gemakkelijk zijn af te leiden.
De in deze studie gevolgde procedure waarbij Q-h relaties zijn afgeleid uit berekeningen met het model WATBAL kan een afwijking veroorzaken ten opzichte van Q-h relaties die afgeleid zijn uit directe meetgegevens. Bij een toenemend aantal punten waarop men de Q-h relatie baseert, wordt de afwijking kleiner.
- De door DEN BESTEN (1986) getrokken conclusie dat het model SWATRE voor ecologische toepassingen in vergelijking tot andere modellen matig gebruikersvriendelijk is, is relatief. Na bewerking van de invoergegevens die voor het model WATBAL beschikbaar waren, werden met SWATRE goede resultaten bereikt.

De met behulp van WATBAL/BALANCE berekende vocht/luchtprofielen voor de bekeergrond in Groot Zandbrink zijn gebruikt in verdere simulaties met ANIMO en EPIDIM. Dit is gedaan vanwege het feit dat de uitvoer van WATBAL/BALANCE direct als invoer kan dienen voor ANIMO.

De locatie Groot Zandbrink is gekozen omdat van dit gebied relatief veel meetgegevens voorhanden zijn die in verder uit te voeren simulaties bruikbaar zijn.

6.2. Simulaties met het model ANIMO

Voor een bodemprofiel van een beekeerdgrond in het natuurreservaat 'Groot Zandbrink' zijn ter berekening van de geproduceerde hoeveelheden CO_2 en de H^+ produktie/consumptie als gevolg van nitrificatie/-denitrificatie simulaties uitgevoerd met het model ANIMO.

Bij de simulatie is gebruik gemaakt van parameterwaarden die zijn gevonden bij de calibratie van het model voor een onbemest graslandperceel te Ruurlo van het 'Regionaal onderzoekcentrum' Heino, en waarden voor het organische stofgehalte van het beschouwde profiel die worden gegeven door KEMMERS & JANSEN (1980). De bovengrondse droge stofproduktie wordt op 2000 kg/ha/jaar geschat. In appendix 4 zijn een aantal relevante parameterwaarden weergegeven die bij de simulatie zijn gebruikt.

De simulatie is uitgevoerd voor 12 weerjaren. De meteorologische gegevens en de gemeten grondwaterstanden van de jaren 1978 tot en met 1982 zijn 2 maal achter elkaar gebruikt als invoer, met daarna de gegevens van 1985 en 1986.

Voor een uitgebreide beschrijving van de invoer voor het model ANIMO wordt verwezen naar KROES (1987).

De eerste 10 jaren worden als aanloopfase beschouwd. Effecten van eventuele fouten in de schattingen van de initiële toestand worden in deze aanloopperiode uitgedempt. De berekende CO_2 -produkties liggen in dezelfde orde van grootte als de produkties die worden berekend door BOUTEN et.al. (1984) en KEMMERS (1987).

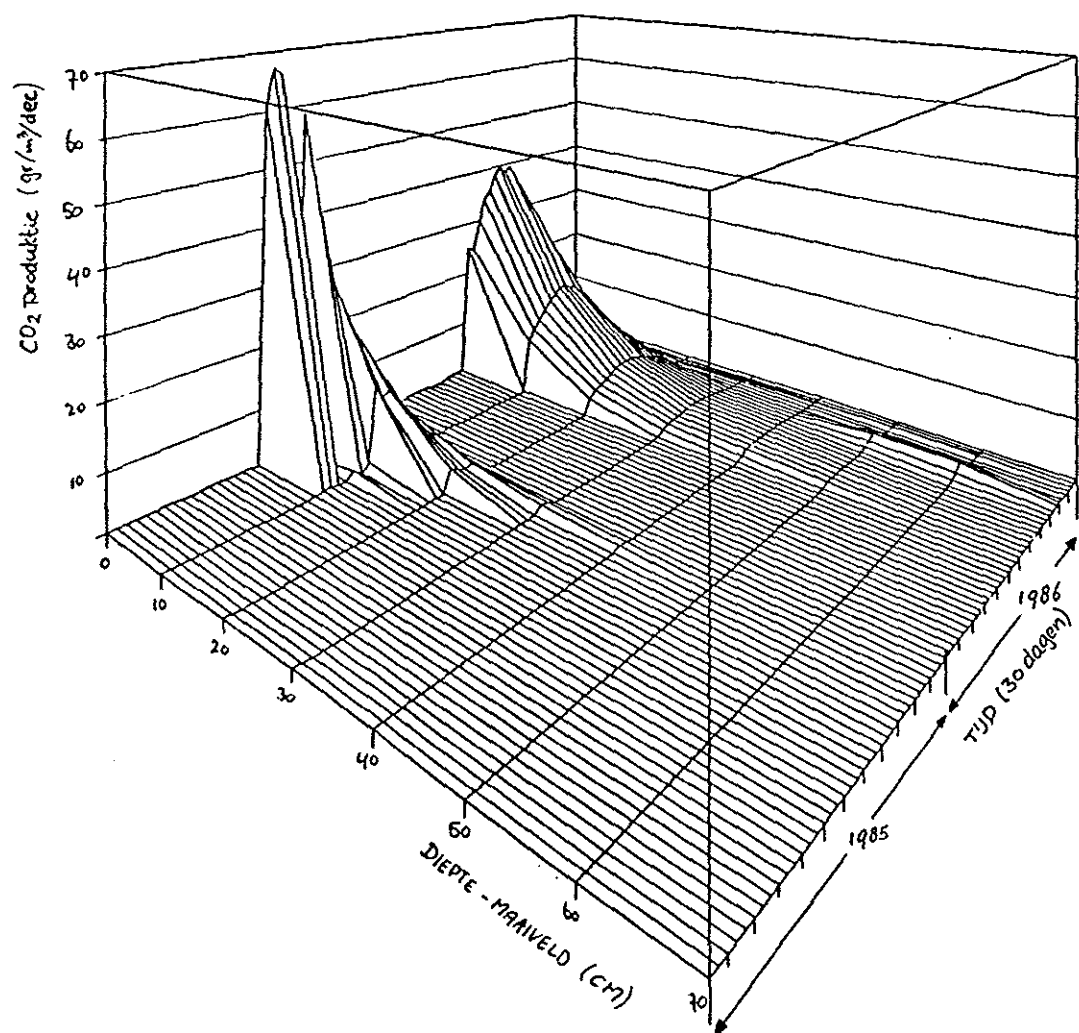


Fig. 11a. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86, uitgezet tegen de tijd en tegen de bodemdiepte

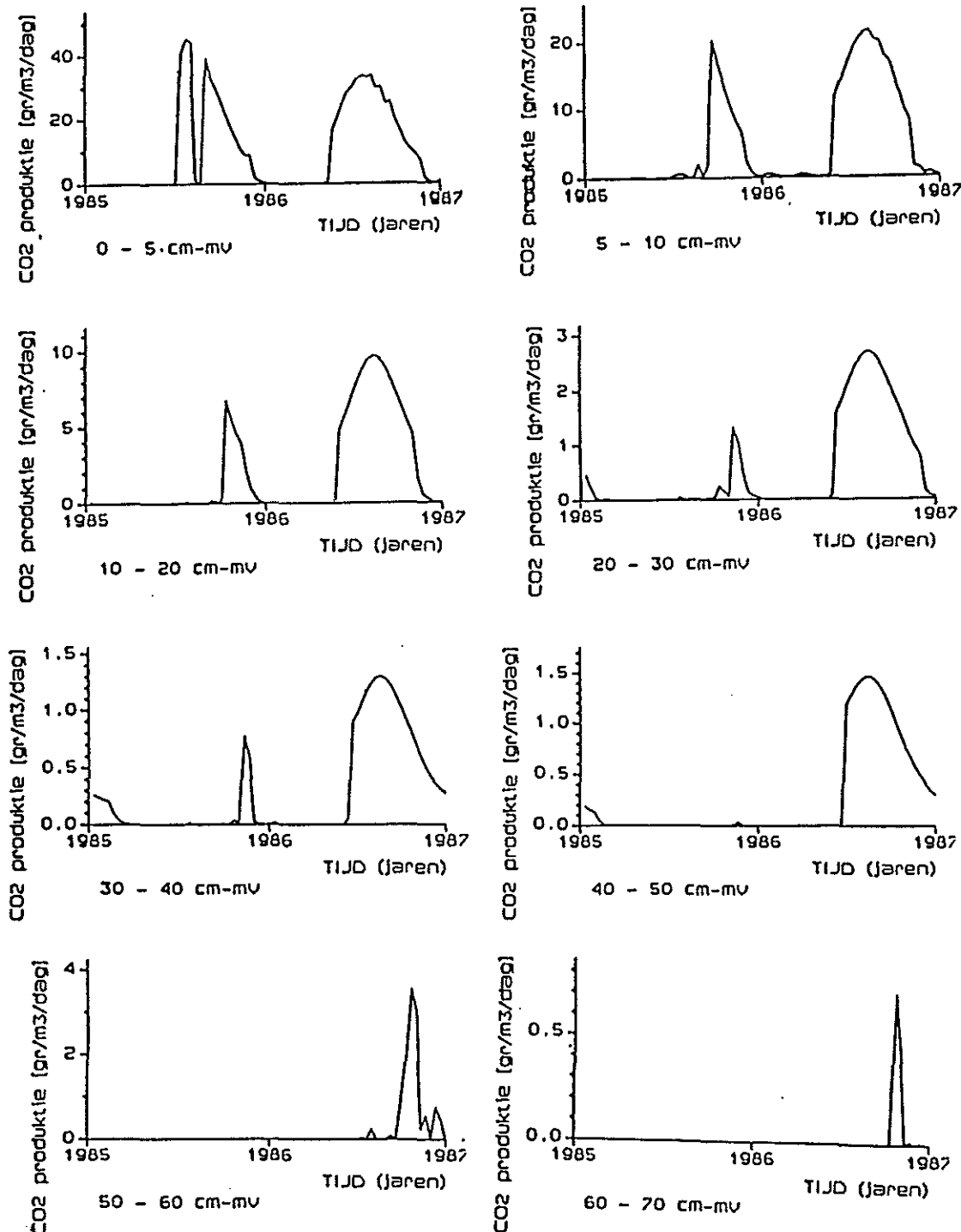


Fig. 11b. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 0-5 cm-mv uitgezet tegen de tijd
 Fig. 11c. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 5-10 cm-mv uitgezet tegen de tijd
 Fig. 11d. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 10-20 cm-mv uitgezet tegen de tijd
 Fig. 11e. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 20-30 cm-mv uitgezet tegen de tijd
 Fig. 11f. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 30-40 cm-mv uitgezet tegen de tijd
 Fig. 11g. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 40-50 cm-mv uitgezet tegen de tijd
 Fig. 11h. Met ANIMO berekende CO₂ produkties voor 85/86 in de laag van 50-60 cm-mv uitgezet tegen de tijd

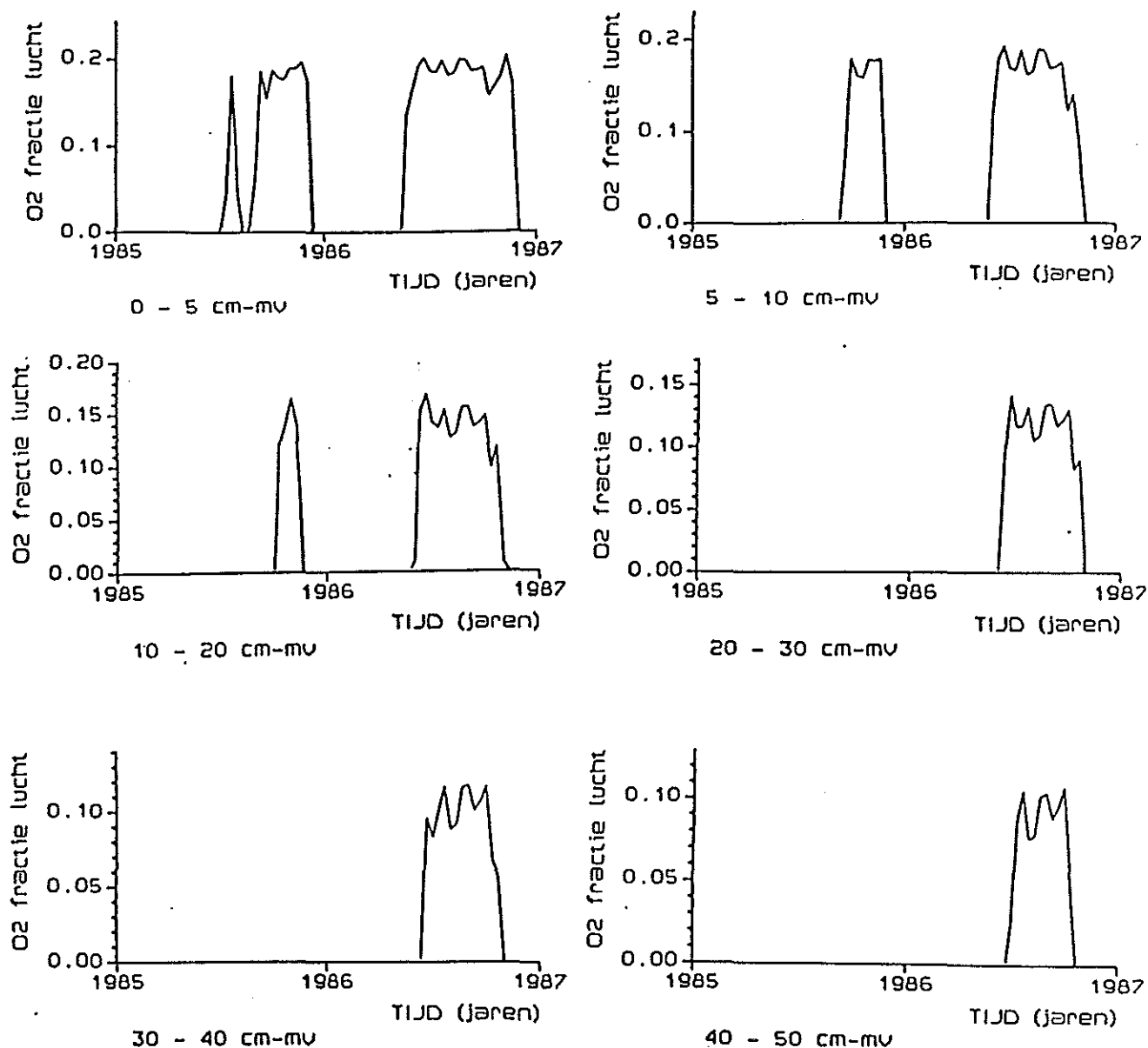


Fig. 12a. Met ANIMO berekende O₂ fracties in de bodemlucht voor 85/86 in de laag van 0-5 cm-mv uitgezet tegen de tijd

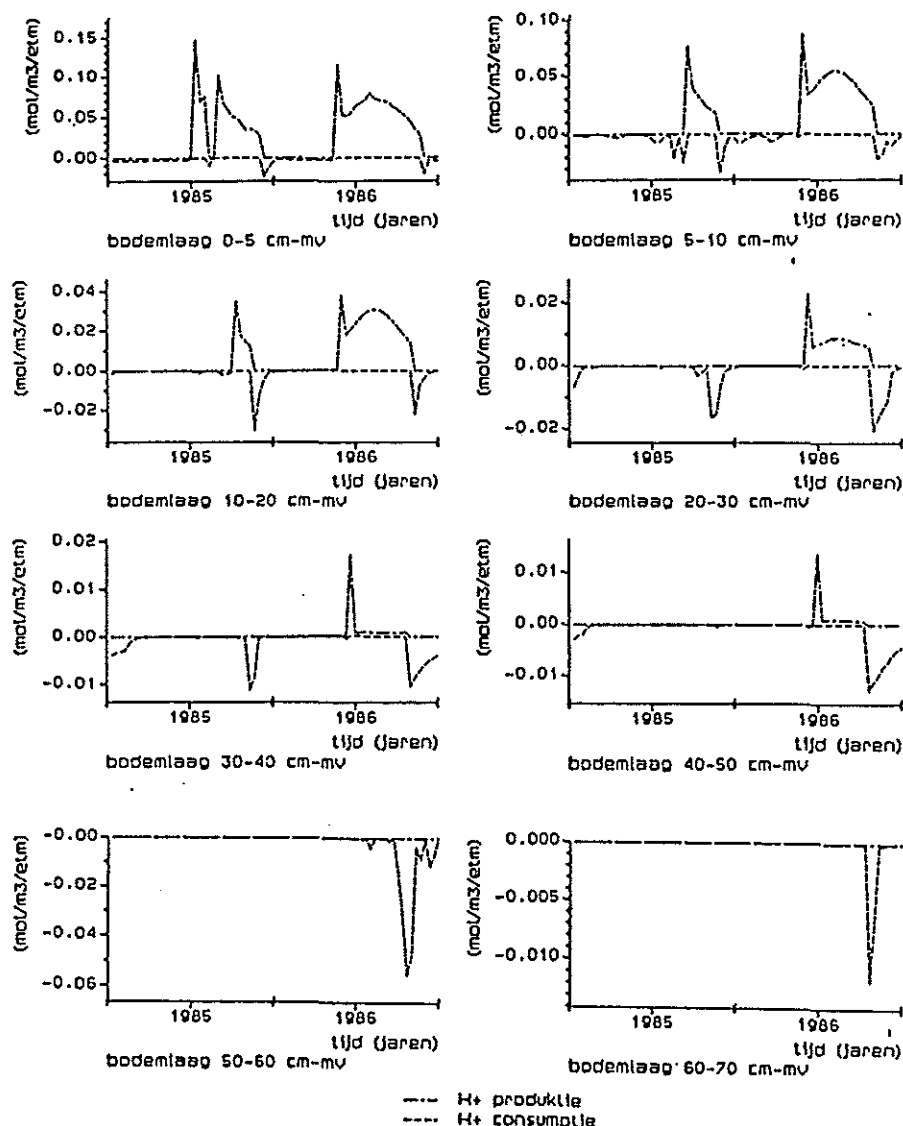
Fig. 12b. Met ANIMO berekende O₂ fracties in de bodemlucht voor 85/86 in de laag van 5-10 cm-mv uitgezet tegen de tijd

Fig. 12c. Met ANIMO berekende O₂ fracties in de bodemlucht voor 85/86 in de laag van 10-20 cm-mv uitgezet tegen de tijd

Fig. 12d. Met ANIMO berekende O₂ fracties in de bodemlucht voor 85/86 in de laag van 20-30 cm-mv uitgezet tegen de tijd

Fig. 12e. Met ANIMO berekende O₂ fracties in de bodemlucht voor 85/86 in de laag van 30-40 cm-mv uitgezet tegen de tijd

Fig. 12f. Met ANIMO berekende O₂ fracties in de bodemlucht voor 85/86 in de laag van 40-50 cm-mv uitgezet tegen de tijd



- Fig. 13a. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 0-5 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13b. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 5-10 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13c. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 10-20 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13d. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 20-30 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13e. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 30-40 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13f. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 40-50 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13g. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 50-60 cm-mv uitgezet tegen de tijd
- Fig. 13h. Met ANIMO berekende H^+ produkties/consumpties voor 85/86 als gevolg nitrificatie/denitrificatie, in de laag van 60-70 cm-mv uitgezet tegen de tijd

6.3. Simulaties met het model EPIDIM

Met het model EPIDIM is het mogelijk het transport van verschillende chemische componenten te simuleren. Naast het transport van H^+ , Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , HCO_3^- en SO_4^{--} in de waterfase wordt ook het transport van CO_2 in de luchtfase in beschouwing genomen.

Voor de veldpodzollocatie in Groot Zandbrink zijn er simulaties uitgevoerd voor de jaren 1985 en 1986. Door JANSEN & KEMMERS (1987) zijn er gedurende deze periode achttien maal bodemvocht bemonsteringen uitgevoerd op vijf verschillende diepten in het bodemprofiel. In het veld of in het laboratorium zijn deze monsters aan verschillende chemische bepalingen onderworpen. Onderzocht zijn onder andere de pH, het totaal anorganisch koolstof gehalte, de EC (bij 20°C), en concentraties van Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , HCO_3^- en SO_4^{--} .

Alvorens op de resultaten van de uitgevoerde simulaties met het model EPIDIM in te gaan volgt eerst een deel waarin de gemeten veldgegevens worden gepresenteerd. De presentatie van de meetgegevens geschiedt steeds aan de hand van figuren waarin de variatie van de betreffende parameter in de tijd en in de diepte van het bodemprofiel wordt weergegeven met behulp van isolijnen en rasters. De exacte meetdata (90 per parameter) zijn ten behoeve van de duidelijkheid uit de figuren weggelaten. In alle figuren zijn tevens de gemeten grondwaterstanden en de neerslaggegevens op decadebasis weergegeven.

6.3.1. Presentatie van de veldgegevens

Om de samenhang tussen de gepresenteerde veldgegevens te vergroten volgen allereerst enige figuren waarin enkele hydrologische aspecten van de beekerdlocatie worden weergegeven. Deze figuren zijn geconstrueerd aan de hand van de resultaten van de in hoofdstuk 6.1.1. beschreven WATBAL/BALANCE simulaties.

Figuur 14 geeft een beeld van de met behulp van WATBAL/BALANCE berekende luchtfracties gedurende de periode 1985-1986 als functie van de diepte. Uit deze figuur is duidelijk te zien dat 1985 een relatief nat jaar is geweest waarbij de grondwaterstand niet verder dan circa 30 cm beneden maaiveld daalt. In de zomerperiode van 1986 droogt de wortel-

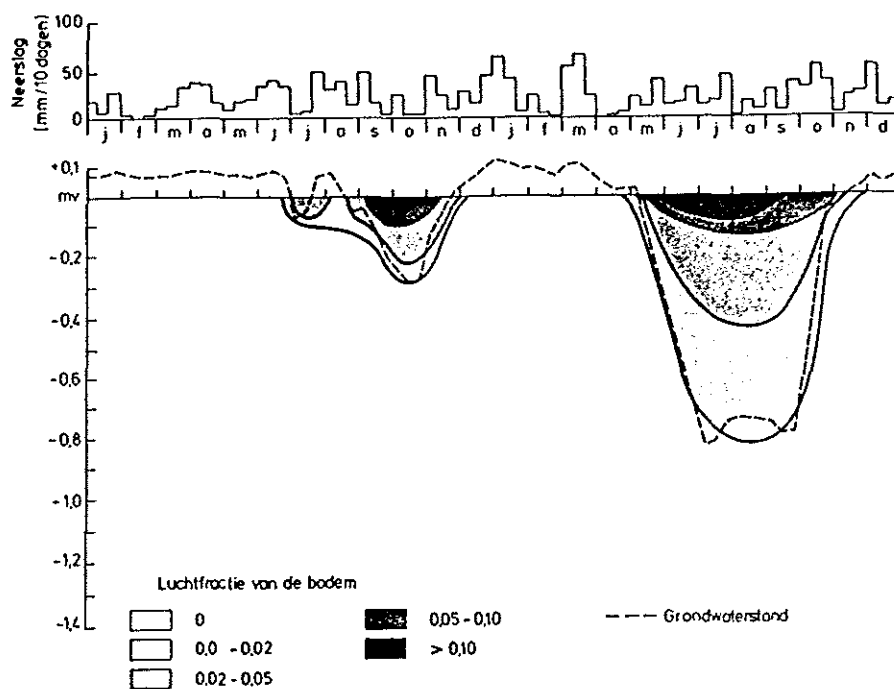


Fig. 14. Berekende bodemluchtfractionen in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

zone (tot 10 cm) behoorlijk uit in tegenstelling tot de ondergrond die zelfs in augustus maar maximaal vijf volumeprocenten lucht bevat.

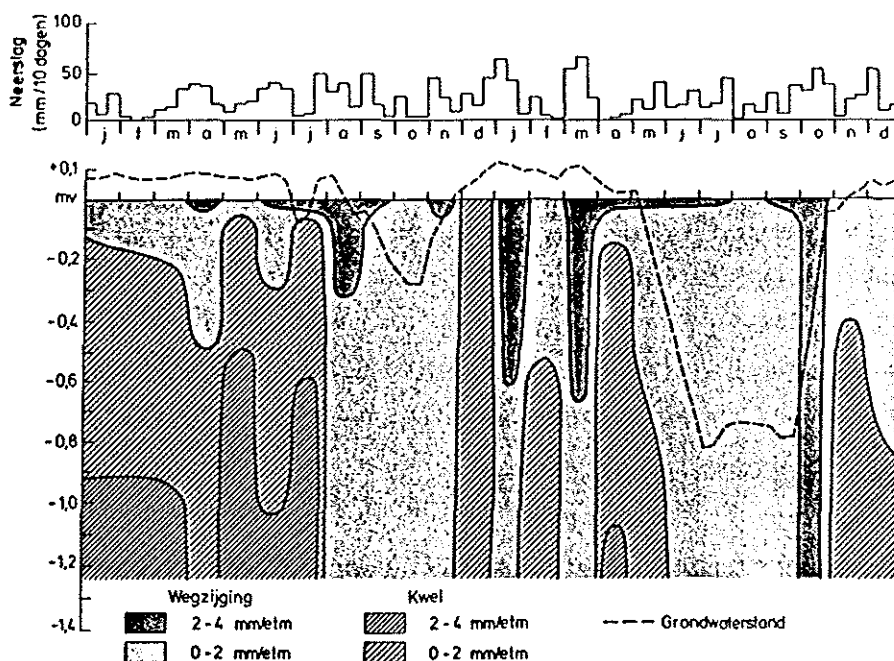


Fig. 15. Berekende fluxen in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

In figuur 15 komt de invloed van de regionale hydrologie tot uiting in de afwisselende optredende kwel/wegzijgingsperioden. Het optreden van kwel vindt voornamelijk in de winter plaats. De mate waarin kwel/wegzijging kan plaatsvinden is een invoergegeven voor het model WATBAL. De weergegeven waarden zijn het resultaat van de berekeningen die vervolgens met BALANCE zijn uitgevoerd.

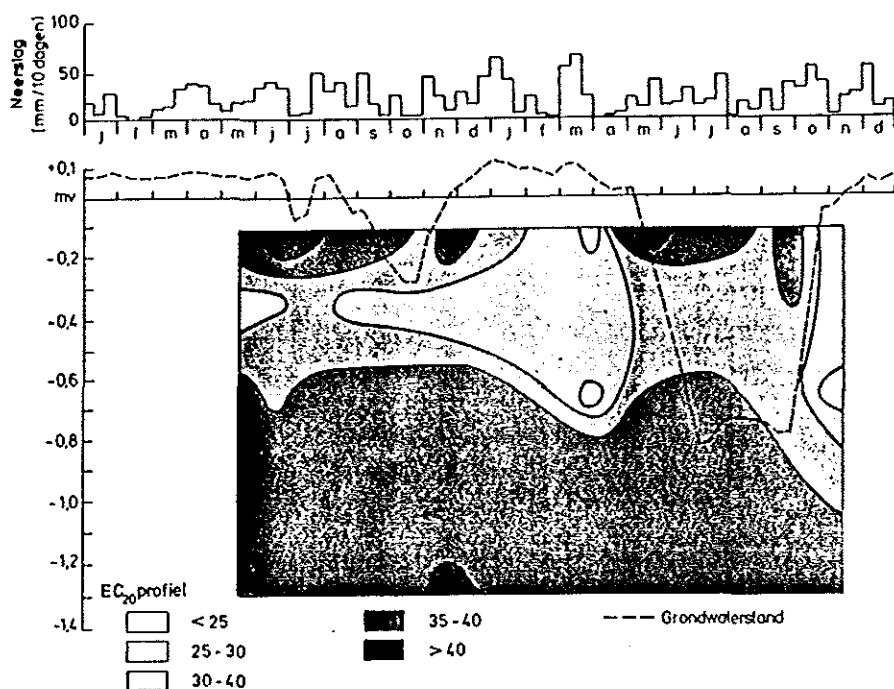


Fig. 16. Gemeten EC-waarden in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Figuur 16 geeft een beeld van de variatie in EC in het betreffende bodemprofiel gedurende de periode 1985-1986. Hieruit blijkt dat de ondergrond een constante EC bezit. Eventueel kwelwater bezit blijkbaar geen significant ander geleidingsvermogen dan het lokaal aanwezige. Tot een diepte van circa 60 cm beneden maaiveld heeft het bodemvocht een geringer geleidingsvermogen. Zeer laag zijn deze in de winterperioden als gevolg van de langdurige regenval en de daarmee gepaard gaande indringing van regenwater in het profiel. Gedurende de zomerperioden (april-oktober) stijgt de EC in de bovengrond (tot 20 cm beneden maaiveld) in waarde als gevolg van indampingseffecten.

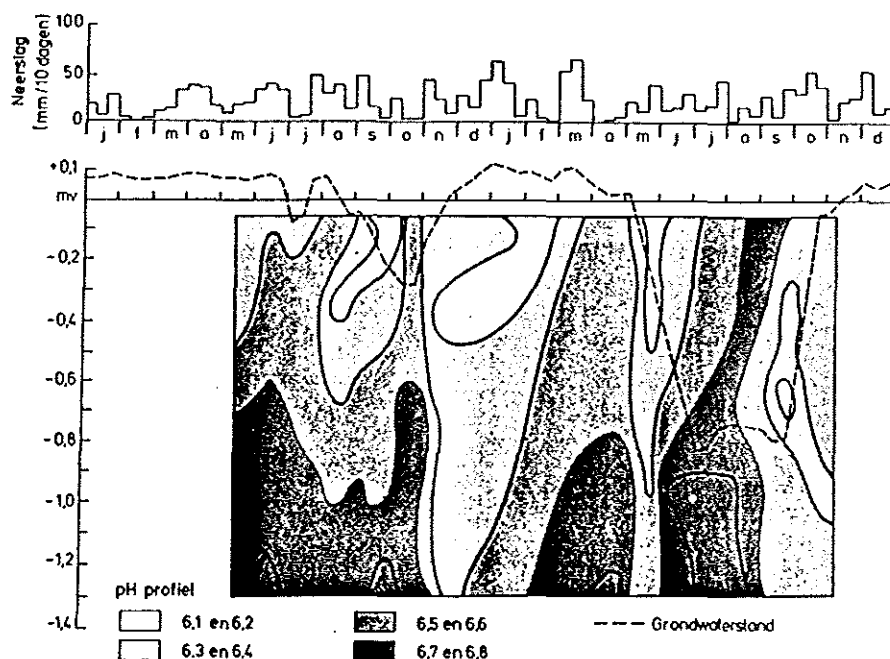


Fig. 17. Gemeten pH-waarden in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

De variatie in pH is weergegeven in figuur 17. Opvallend is dat in de winterperiode 1985-1986 de pH tot diep in het bodemprofiel afneemt. Een dergelijk diepe doorspoeling van het profiel is niet aannemelijk gezien de kwel/wegzijgingsfluxen uit figuur 15.

Een andere verklaring ligt in het feit dat als gevolg van het volledig verzadigde profiel de door organische stof afbraak vrijkomende CO_2 niet meer eenvoudig naar de atmosfeer kan diffunderen (diffusieconstante van CO_2 door water is een factor 10000 kleiner dan de diffusieconstante van CO_2 door lucht). Hierdoor vindt er een toename in CO_2 plaats in het gehele profiel. Volgens de evenwichtsreactie



betekent dit dat er eveneens een toename in H^+ en HCO_3^- zal optreden. Uit figuur 18 blijkt dat de HCO_3^- concentratie inderdaad gedurende deze periode over het gehele profiel op een vergelijkbare wijze toeneemt.

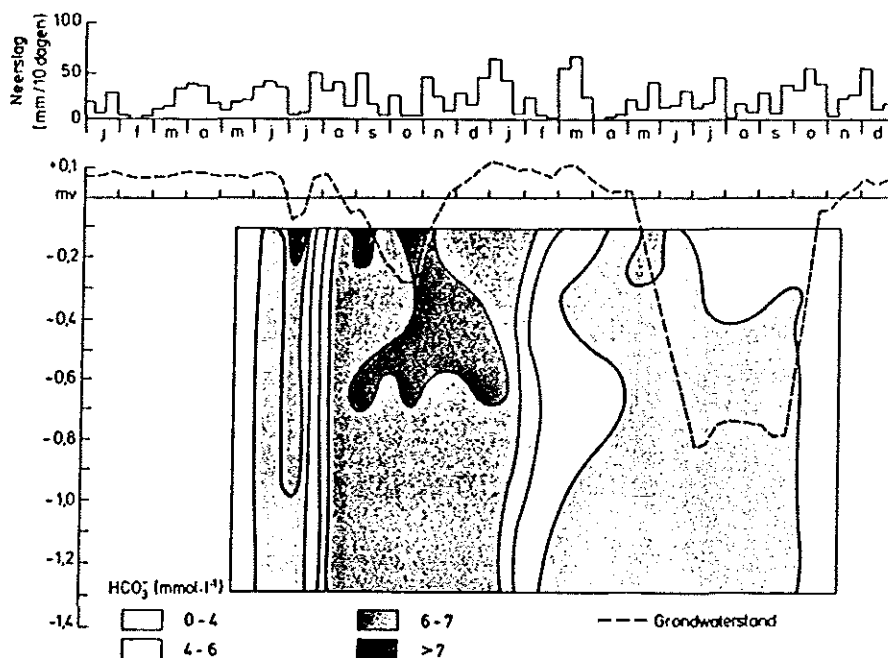


Fig. 18. Gemeten HCO_3^- concentraties in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Met behulp van het model COMPLEX (ABDEL KHALIK & BLÖMER, 1984) zijn uit de gemeten pH en HCO_3^- concentraties de bijbehorende bodem CO_2 spanningen berekend. Deze zijn weergegeven in figuur 19. De hoogste CO_2 spanningen worden in exact dezelfde periode aangetroffen wat bovenstaande theorie zeer aannemelijk maakt.

Een, als gevolg van een verzadigd bodemprofiel, optredende toename in CO_2 spanning moet een evenredige toename in het totaal koolstofgehalte veroorzaken. Deze parameter is in het laboratorium bepaald voor de betreffende watermonsters. Uit figuur 20 blijkt dat er in de winterperiode 1985-1986 inderdaad sprake is van een hoog totaal koolstofgehalte. De laagste koolstofgehalten worden aangetroffen in de bovengrond gedurende de zomer van 1986. In deze periode is er een open interactie tussen de bodemlucht en atmosfeer waardoor bij organische stof afbraak vrijkomende CO_2 direct naar de atmosfeer kan ontsnappen. Dit leidt weer tot een verschuiving naar links in het evenwicht (30) en dus tot een afname in H^+ (= toename in pH) en HCO_3^- concentraties (zie figuren 17 en 18).

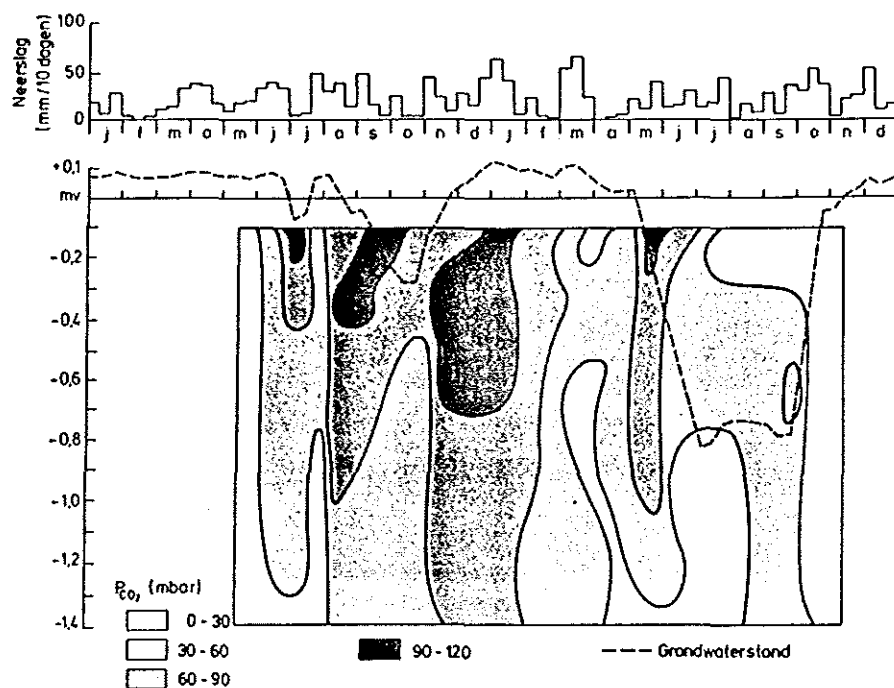


Fig. 19. Berekende CO_2 spanningen in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

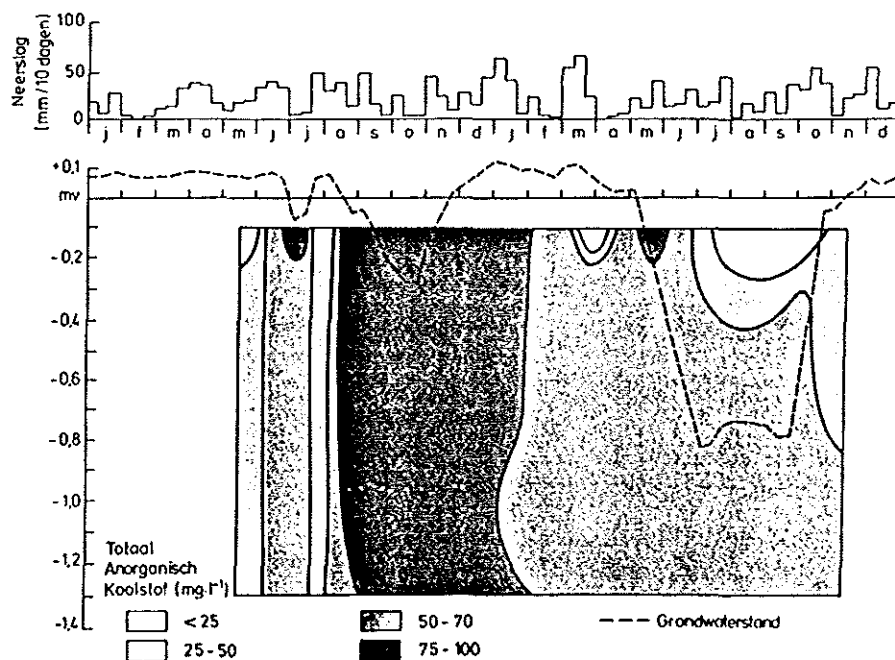


Fig. 20. Gemeten totaal anorganisch koolstofgehalte in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

In de zomer van 1986 vindt er in de bovengrond van de beekeerdgrond een verschuiving plaats van, de in het algemeen overheersende, reducerende omstandigheden naar oxiderende. Dit is onder andere af te leiden uit figuur 21 waarin de gemeten sulfaat concentraties staan weergegeven. Uit deze figuur blijkt dat in een kleine periode in de zomer van 1985 en de gehele zomer van 1986 hoge SO_4^{--} concentraties zijn aangetroffen. KEMMERS & JANSEN (1987) schrijven dit verschijnsel toe aan oxidatie van pyriet. Pyriet is onder reducerende omstandigheden een stabiel mineraal (RITSEMA, 1987). Bij daling van de grondwaterstand en dientengevolge bij luchtintreding in de bodem kan er oxidatie plaatsvinden van het aan pyriet gebonden sulfide. Hierbij ontstaat naast SO_4^{--} ook H^+ . Een daling van de pH is in de betreffende periode echter niet waargenomen (zie figuur 17). Dit betekent dat de toename in H^+ als gevolg van de pyriet oxidatie waarschijnlijk te niet wordt gedaan door de relatief grotere afname in H^+ als gevolg van het ontwijken van CO_2 naar de atmosfeer. Dat dit laatste proces optreedt is al aannemelijk gemaakt met behulp van de figuren 17, 19 en 20.

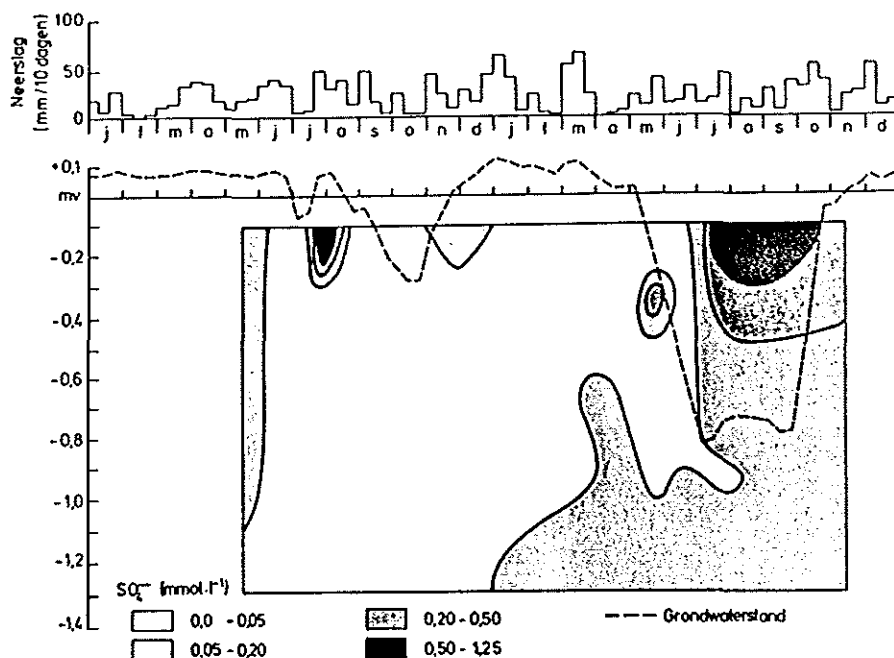


Fig. 21. Gemeten SO_4^{--} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

KEMMERS & JANSSEN (1987) verklaren het uitblijven van een pH daling in de zomer van 1986 door te veronderstellen dat H^+ ionen reageren met bepaalde bodemmineralen waardoor Al^{+++} ionen vrijkomen. Deze Al^{+++} ionen verdrijven, waarschijnlijk tezamen met wat resterende H^+ ionen, Ca^{++} van het adsorptiecomplex. Dit zal dan gepaard moeten gaan met een stijging van de Ca^{++} concentratie in de bodemoplossing. Dit wordt inderdaad ook aangetroffen (zie figuur 22). Meer waarschijnlijk lijkt het echter dat deze geringe stijging van de Ca^{++} concentratie in de zomerperioden het gevolg is van indampingseffecten. Dit wordt nog eens extra ondersteund door de eveneens in de zomers aangetroffen hogere EC waarden voor de bovengrond (zie figuur 16).

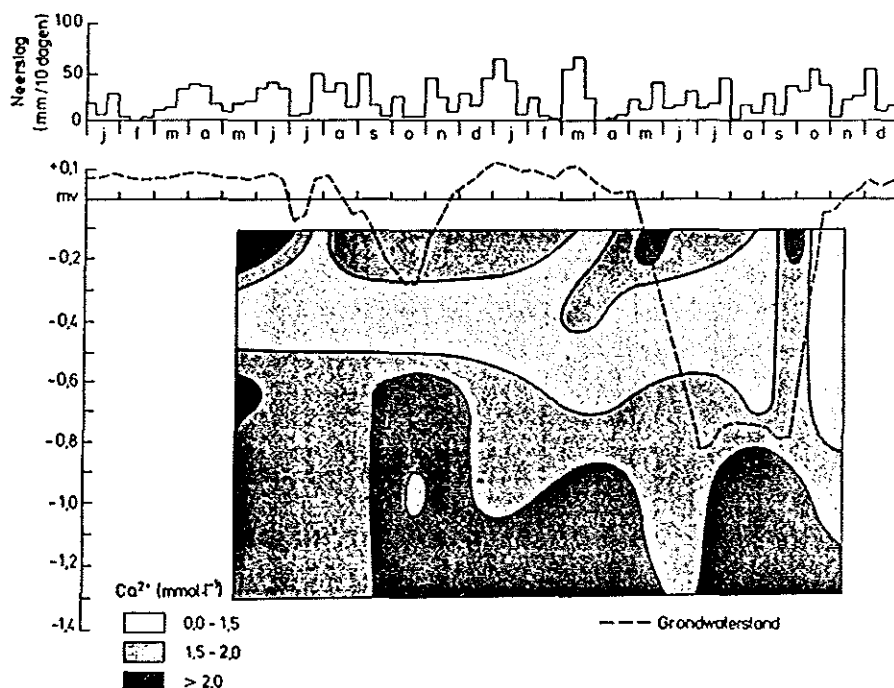


Fig. 22. Gemeten Ca^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Dit indampingseffect is ook terug te vinden in de figuren die de variatie in de Na^+ en Mg^{++} concentraties in de bodem weergeven (zie figuren 23 en 24).

Chloride vertoont in tegenstelling tot de andere ionen een afwijkend, moeilijk verklaarbaar, patroon (zie figuur 25). Veranderingen in concentraties treden min of meer tegelijkertijd, uniform over het gehele profiel op.

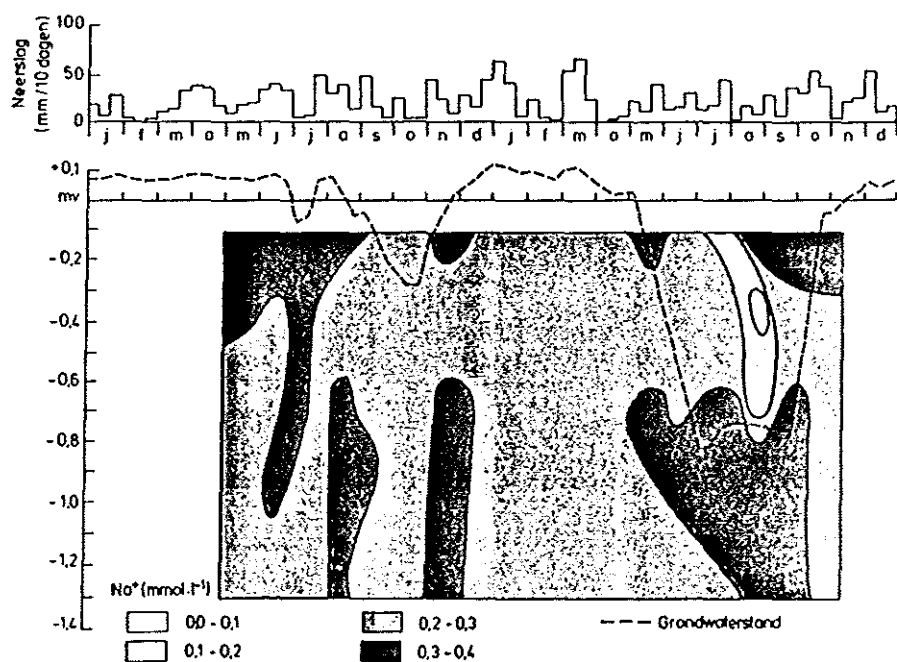


Fig. 23. Gemeten Na^+ concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

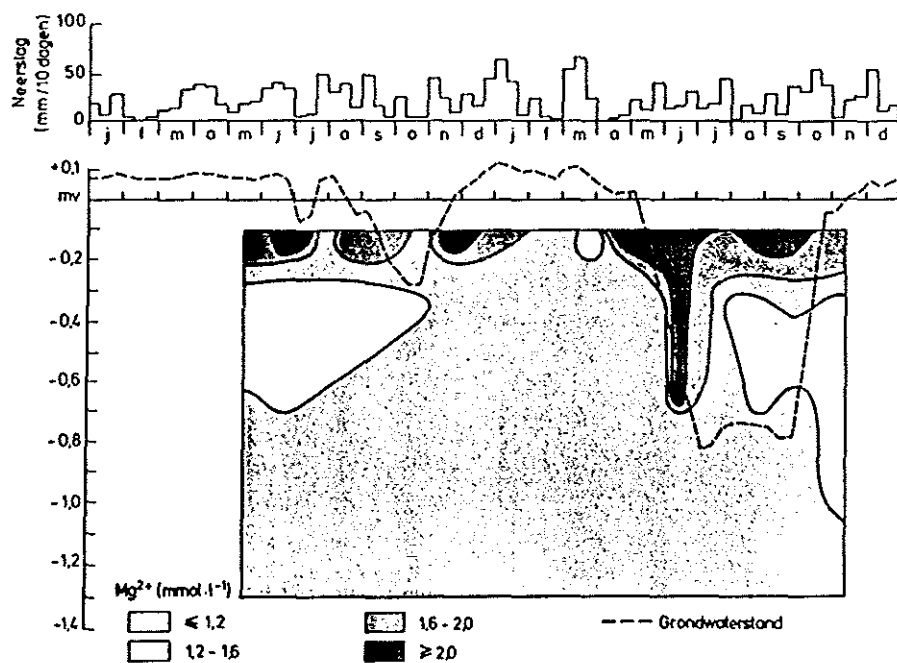


Fig. 24. Gemeten Mg^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

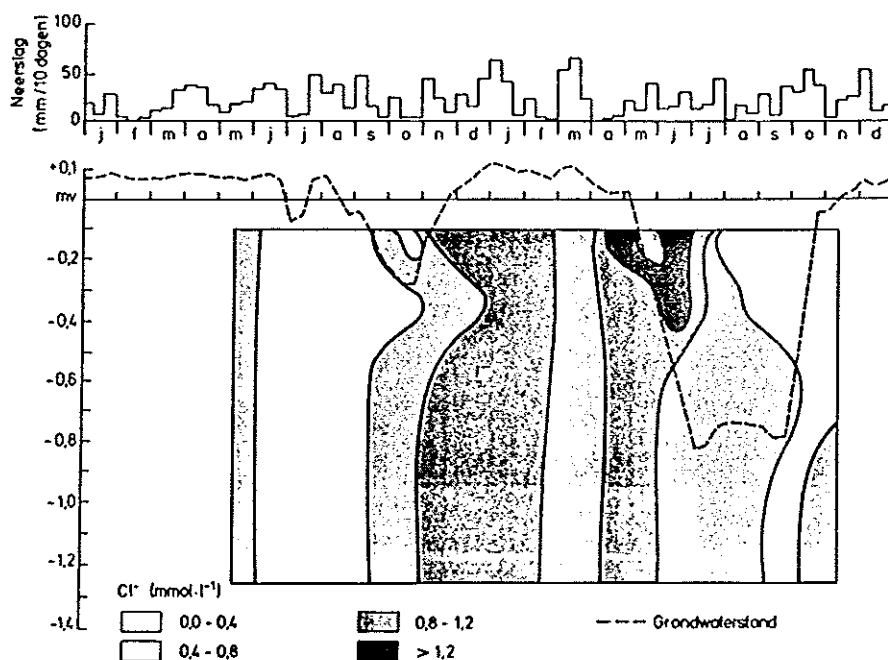


Fig. 25. Gemeten Cl^- concentraties in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Mogelijke oorzaken kunnen zijn:

- * Chloride is een conservatieve stof die niet wordt gebufferd door chemische interacties.
- * De hoge concentraties in de bovenste 30 cm in mei 1986 kunnen zijn veroorzaakt door bemestingsinvloeden vanuit de omgeving en indringing van dooiwater in het profiel.
- * In de winterperiode staat er een waterlaag van circa 10 cm op het maaiveld. Deze waterlaag bevat stoffen die bovenstrooms zijn uitgespoeld. Voor de concentratie van het water dat in deze locatie gedurende de inundatieperiode het profiel binnen dringt, kan niet de concentratie van regenwater worden genomen.

In figuur 26 is de Ionen Ratio uitgezet tegen de diepte en tegen de tijd. De Ionen Ratio (IR) is een maat voor het calcium aandeel in de totale kationencompositie en wordt als volgt gedefinieerd:

$$\text{IR} = \frac{2[\text{Ca}^{++}]}{2[\text{Ca}^{++}] + [\text{Cl}^-]} \quad (31)$$

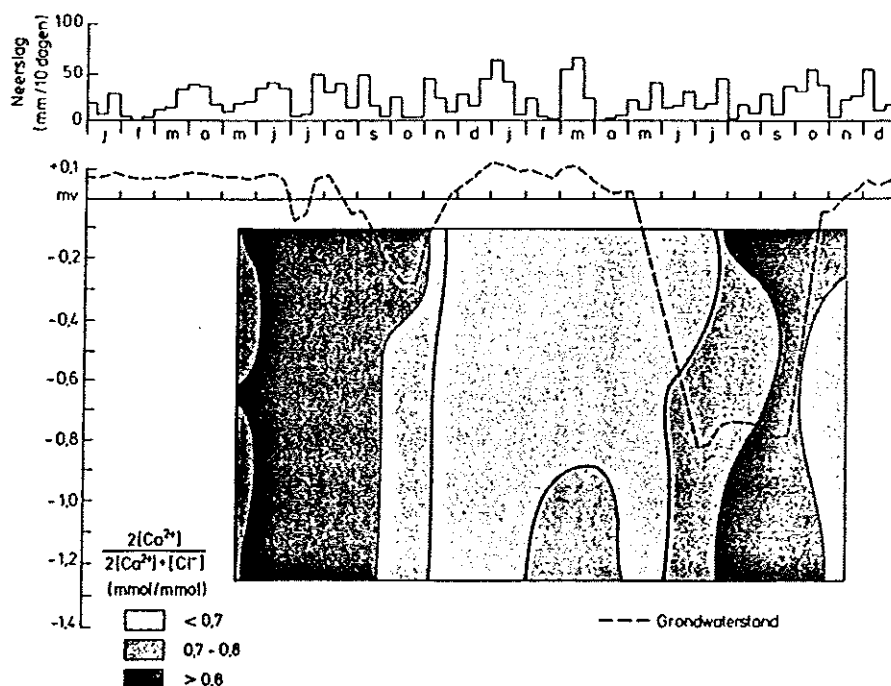


Fig. 26. Gemeten Ionen Ratio's in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Hierin zijn $[Ca^{++}]$ en $[Cl^-]$ de concentraties van calcium en chloride in $mol.l^{-1}$.

De tendensen in figuur 26 zijn voornamelijk het resultaat van het verloop in de chlorideconcentraties (zie figuur 25).

In figuur 27 zijn de met het model COMPLEX (ABDEL KHALIK & BLÖMER, 1984) berekende $CaCO_3$ verzadigingsgraden in evenwicht met de bodemlucht weergegeven. In het gehele profiel is er bij de heersende bodemcondities sprake van onderverzadiging. De verzadigingsgraad neemt globaal met de diepte toe. Dit kan worden verklaard uit de toenemende invloed van kwelwater. Dezelfde tendens is waar te nemen in het verloop van de pH en de calciumconcentraties (figuur 17 en figuur 22). Indien de watermonsters uit het bodemprofiel worden blootgesteld aan de buitenlucht zal de druk de waarde van circa 1 atmosfeer aannemen. De partiële CO_2 druk in de atmosfeer bedraagt circa $10^{-3,52}$ atm. Dit is aanzienlijk lager dan in de bodemlucht (zie figuur 19). Hierdoor verschuiven de CO_2 evenwichten wat tot gevolg heeft dat de $[CO_3^{--}]$ toeneemt. De verzadigingsgraden in deze hypothetische situatie zullen boven 1 komen te liggen waardoor calciet zou neerslaan (figuur 28). In kwelprofielen zal in het traject waar de CO_2 diffusiemogelijkheid groot genoeg is, calciet neerslaan.

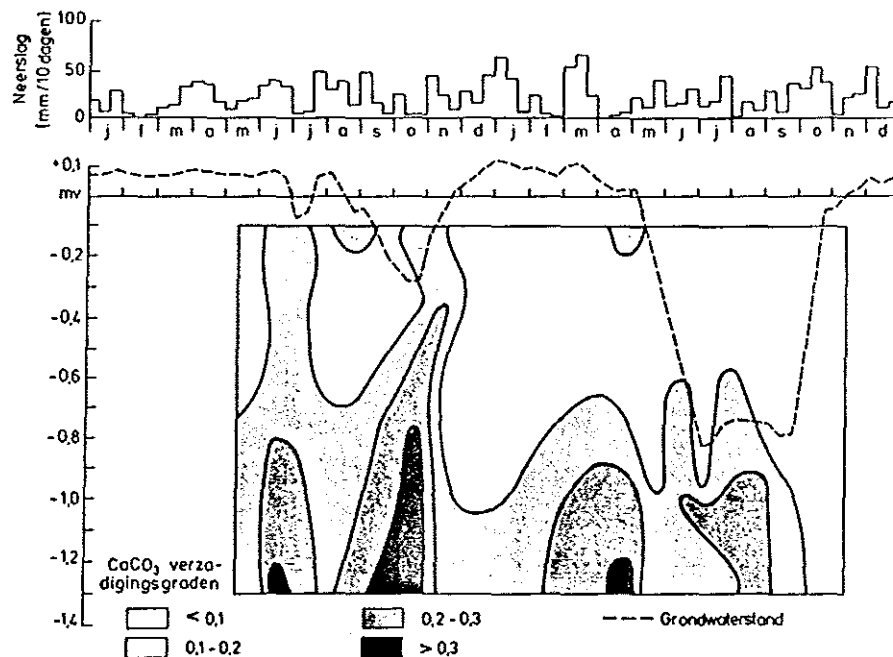


Fig. 27. Berekende CaCO_3 verzadigingsgraden met CO_2 concentraties in evenwicht met bodemlucht in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

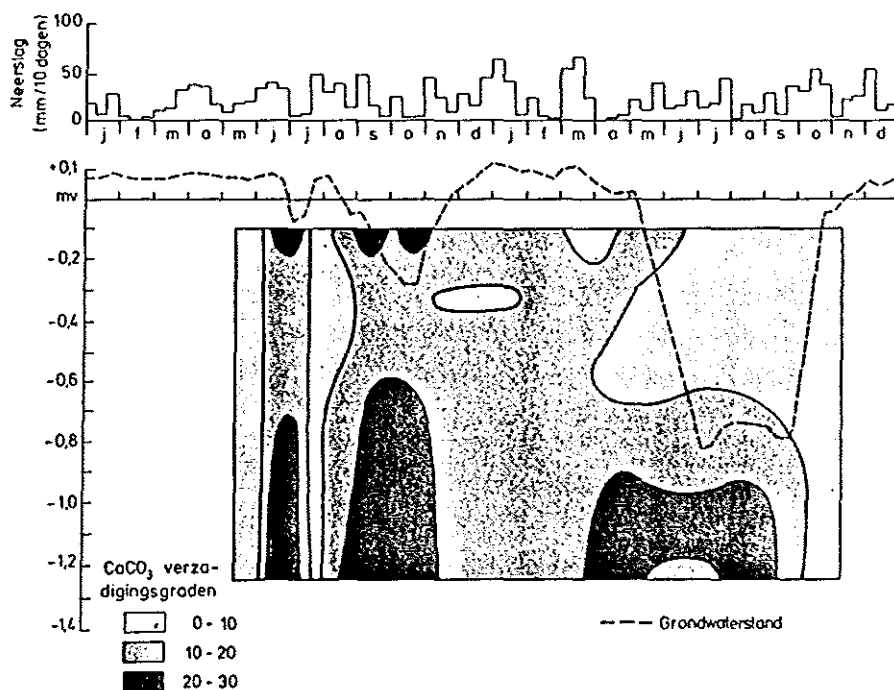


Fig. 28. Berekende CaCO_3 verzadigingsgraden met CO_2 concentraties in evenwicht met de atmosfeer in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

6.3.2. Presentatie van de berekeningen

Om simulaties met het model TRAWOS/EPIDIM uit te voeren dienen er drie invoerfiles aangemaakt te worden, namelijk CRAIN.DAT, CSEEP.DAT en CO2IN.DAT. Een beschrijving van de benodigde invoer is gegeven in appendix 5.

In CRAIN.DAT staan per tijdstap de concentraties van de verschillende onderscheiden chemische componenten in het water dat door het vlak van het maaiveld in het bodemsysteem infiltreert. In de zomerperiode zijn dit gegevens van de neerslag die zijn gebaseerd op een gezamenlijk door het KNMI/RIVM (1986) uitgebracht rapport. In de winter zijn dit de geschatte concentraties van het inundatie water.

In CSEEP.DAT staan per tijdstap de concentraties vermeld in het bodemvocht dat aan de onderzijde het bodemprofiel verlaat of binnen komt. De gebruikte waarden zijn ontleend aan een reeks veldmetingen uitgevoerd door JANSEN & KEMMERS (1987). De concentraties in een filter op circa 2,2 m-maaiveld van buis worden representatief geacht. Buis 12 bevindt zich op circa 25 m afstand van de locatie waarop de gepresenteerde meetgegevens betrekking hebben. De waarden van de ingevoerde concentraties staan vermeld in appendix 6a en 6b. De invoerfile CO2IN.DAT is weergegeven in appendix 7. In deze file staan de meer algemene gegevens die nodig zijn om het hoofdprogramma te runnen. Voor de parameters die de bodemchemische processen karakteriseren zijn waarden genomen die zijn verkregen bij eerder uitgevoerd onderzoek. De waarden van de Vanselow selectiviteitsconstanten zijn gelijkgesteld aan de waarden die zijn gevonden in een kolomexperiment waarbij een bodemonster uit de Tondense heide is doorgespoeld met Rijnwater (HENDRIKS & GROENENDIJK, 1987).

De reactiesnelheid voor calciëverwerking (KSOL) is gelijk gesteld aan $0,0001 \text{ dag}^{-1}$, overeenkomstig eerdere bevindingen van RITSEMA (1986). Deze waarde wordt van toepassing geacht op relatief 'vers' calcië. In de calibratie is gebruik gemaakt van een reeks van 10 jaren waarvan de fluxen en vochtgehalten per decade zijn ingevoerd. De 10 jaren zijn verkregen door de jaren '85 en '86 vijf maal te herhalen. Deze exercitie is op deze wijze uitgevoerd omdat een reeks van 10 reële weerjaren niet voorhanden is. Eveneens ontbreken de gegevens van een 'gemiddeld weerjaar'.

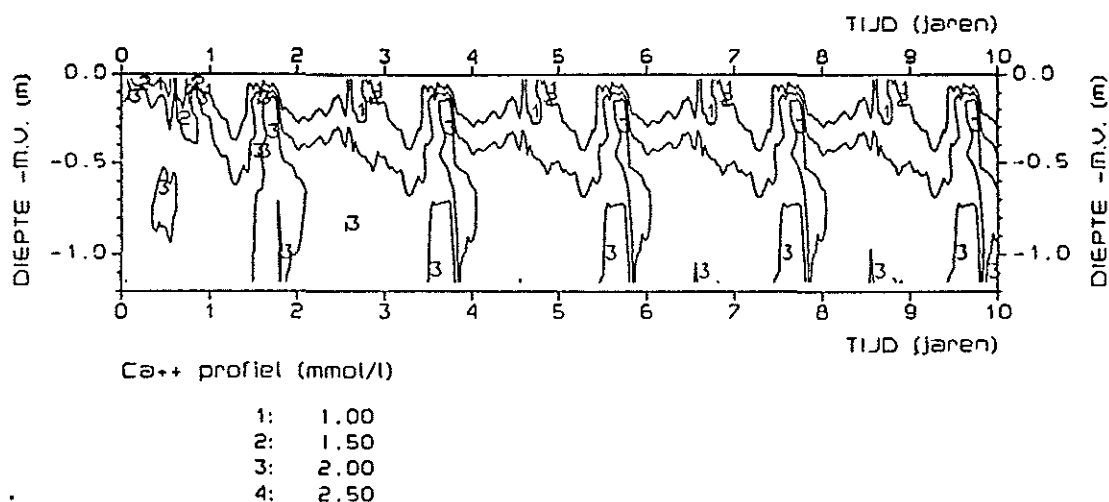


Fig. 29. IJkingsberekeningen voor Ca^{++} concentraties over 10 jaren

Het jaar 1985 had een natte zomer en het jaar 1986 had een relatief droge zomer. Indien het neerslagoverschot over de beide zomers wordt gemiddeld, verkrijgt men een waarde die ongeveer gelijk is aan het gemiddelde zomer-neerslagoverschot.

Het gemiddelde jaarlijkse neerslagoverschot over de beide jaren is ongeveer gelijk aan het gemiddelde jaarlijkse neerslag overschot van circa 310 mm.

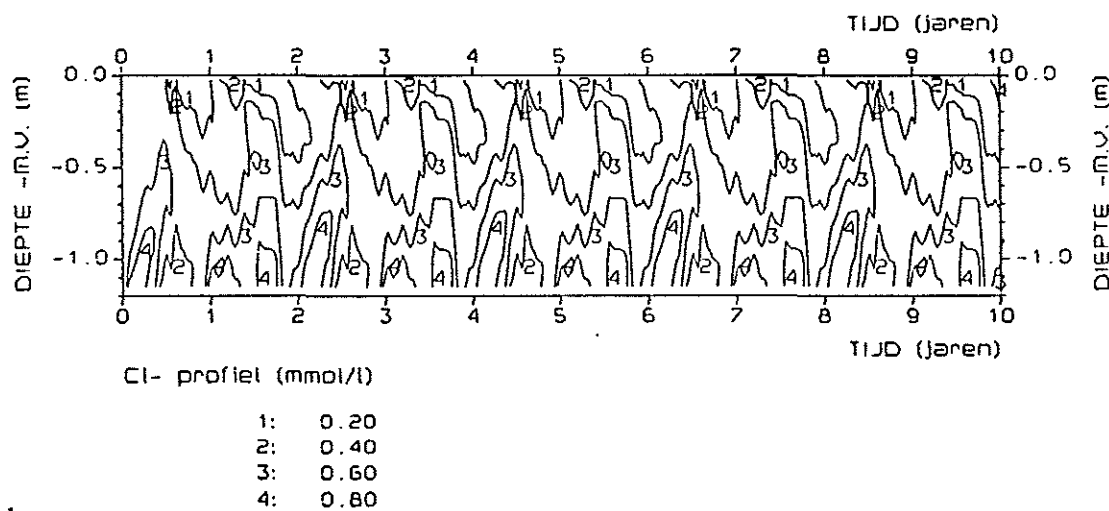


Fig. 30. IJkingsberekeningen voor Cl^{-} concentraties over 10 jaren

Bij de ijkingsberekeningen zijn de concentraties van het inundatie water enigszins aangepast. Het water dat in de winterperiode op het maaiveld staat is gedeeltelijk afkomstig van het stroomopwaarts gelegen gebied. Dit water zal in aanzienlijke mate verrijkt zijn met stoffen. De concentraties in dit water zijn gelijk gesteld aan de concentraties die werden aangetroffen in de meest ondiepe meetpunten tijdens de inundatieperiode.

Er werd verondersteld dat in een dergelijke langjarige berekening een stabiele terugkerende tendens in het verloop van de concentraties van de verschillende chemische componenten zou moeten optreden. Deze trend werd inderdaad aangetroffen. In de figuren 29 tot en met 31 zijn de op deze wijze berekende isoconcentratie lijnen van de componenten Ca^{++} en Cl^- en de pH weergegeven.

De tijdstermijn waarop het bodemsysteem in 'evenwicht' raakt bedraagt circa 3 à 4 jaar. Voor chloride is de termijn iets korter. De cyclus van '85 en '86 is in de figuren vijf maal te herkennen. Bij de Ca^{++} en pH figuren zijn over de gesimuleerde 10 jaar nog steeds kleine veranderingen waarneembaar in de jaarpatronen. Dit kan worden toegeschreven aan de calciëter neerslag- en oplossingsreacties, die traag verlopen.

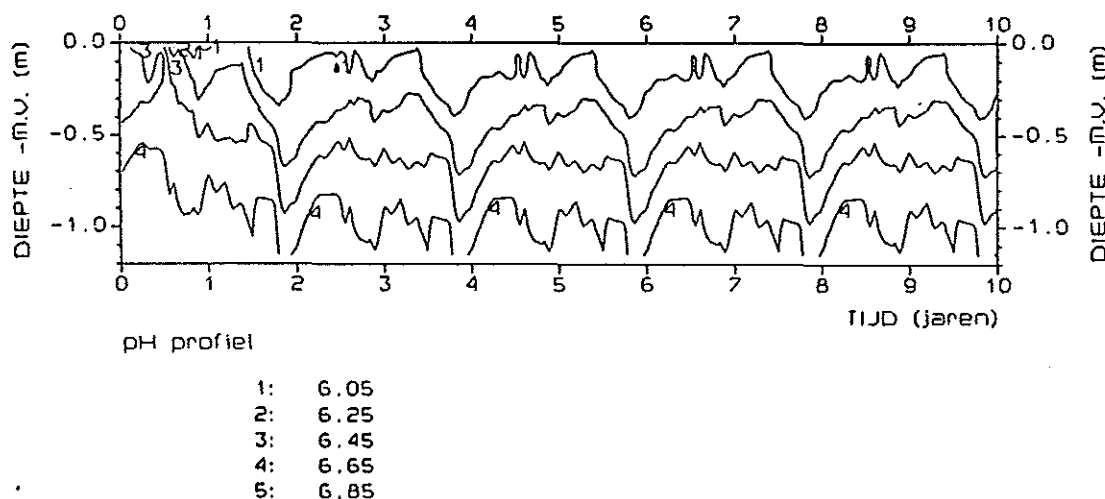


Fig. 31. IJkingsberekeningen voor de pH over 10 jaren

De algemene trend in de zomer- en winterseizoenen wordt goed gesimuleerd, evenals de orde van grootte van de concentraties. De resultaten van deze simulaties kunnen bevredigend worden genoemd.

In de figuren 32 tot en met 42 zijn voor verschillende parameters de berekende isolijnen voor de jaren '85 en '86 weergegeven.

Bij vergelijking van deze figuren met de figuren waarin de gemeten waarden zijn weergegeven (figuren 16 tot en met 18 en figuren 21 tot en met 27) vallen verschillende dingen op:

In de eerste plaats zijn er zowel in de gemeten als in de berekende situaties duidelijke winter- en zomertendensen waarneembaar. In de winter treedt een diepe indringing van regenwater in het profiel op.

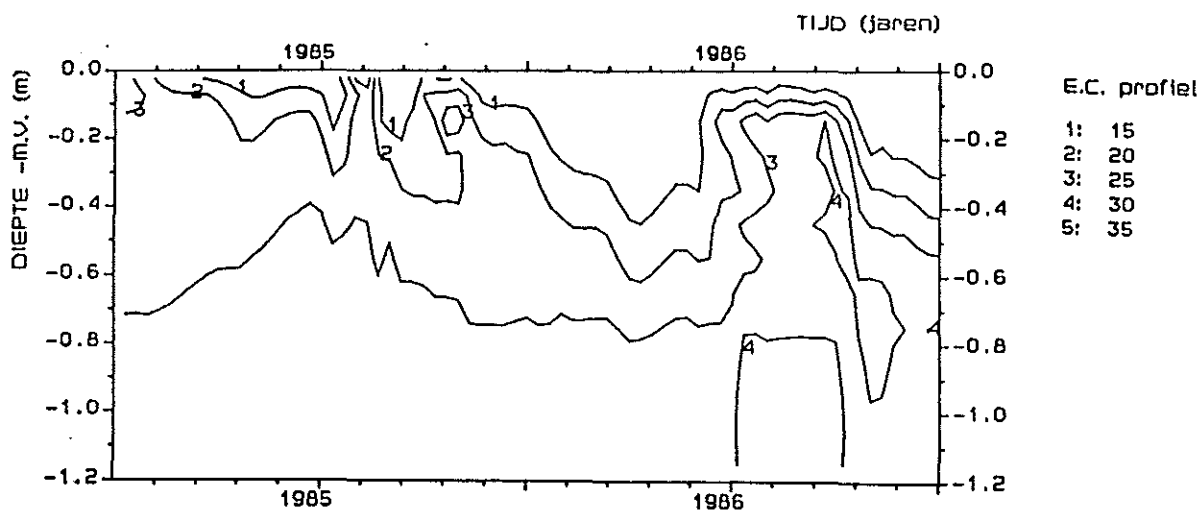


Fig. 32. Gesimuleerde EC-waarden in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

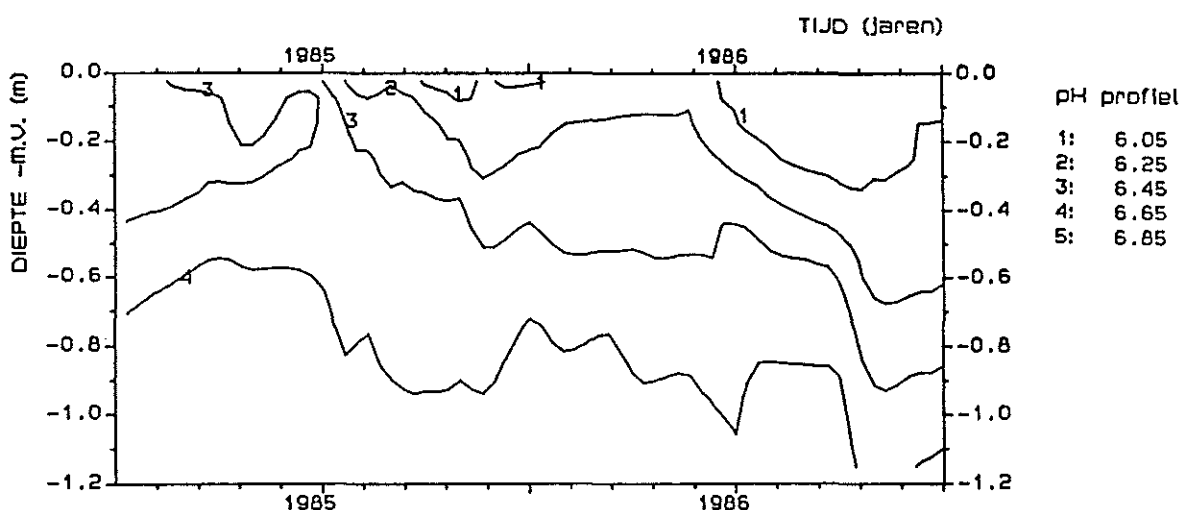


Fig. 33. Gesimuleerde pH-waarden in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

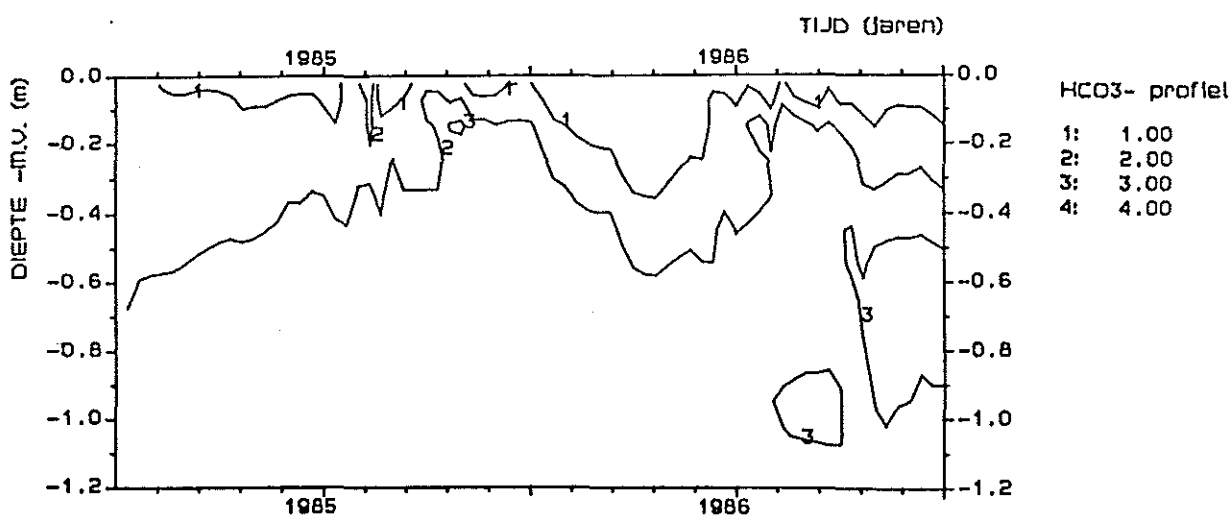


Fig. 34. Gesimuleerde HCO₃⁻ concentraties in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Dit heeft tot gevolg dat er relatief lage concentraties van de verschillende chemische componenten worden aangetroffen en berekend in de bovengrond. In de zomer zijn deze daarentegen hoog, onder andere als gevolg van kwel en indampingseffecten. De gemeten en berekende concentratiewaarden van de verschillende componenten liggen allen, met uitzondering van HCO_3^- en P_{CO_2} , in dezelfde orde van grootte. Dit wordt nog eens geïllustreerd door de bijna identieke EC-profielen (figuren 16 en 32).

In de tweede plaats zijn er tussen de gemeten en berekende pH, HCO_3^- en P_{CO_2} figuren (resp. figuren 17, 18, 19 en 33, 34, 35) enige verschillen te constateren. Hier kunnen verschillende oorzaken aan ten grondslag liggen:

Allereerst valt op dat de berekende HCO_3^- concentraties lager liggen dan de in het veld waargenomen waarden. Er zijn in het onderscheiden bodemsysteem twee potentieel bicarbonaat producerende processen te onderscheiden, namelijk de verwerking (oplossing) van calciëet en de organische stofhuishouding. De verwerking van calciëet is een tijdsafhankelijk proces met een bepaalde intensiteit.

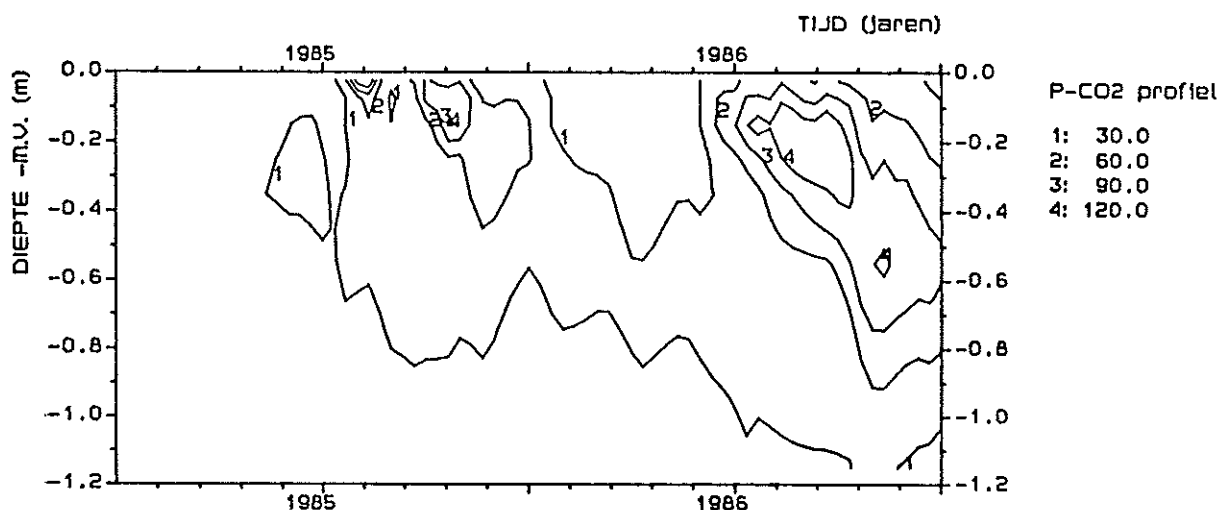


Fig. 35. Gesimuleerde CO_2 -spanningen in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Afhankelijk van deze intensiteit zal er per tijdsstap meer dan wel minder bicarbonaat in het bodemsysteem bijkomen. Naast bicarbonaat wordt er dan eveneens Ca^{++} geproduceerd. Aangezien de berekende isoconcentratielijnen van Ca^{++} redelijk goed overeenkomen met de gemeten waarden wordt er verondersteld dat de inschatting van KSOL op een juiste wijze is geschied.

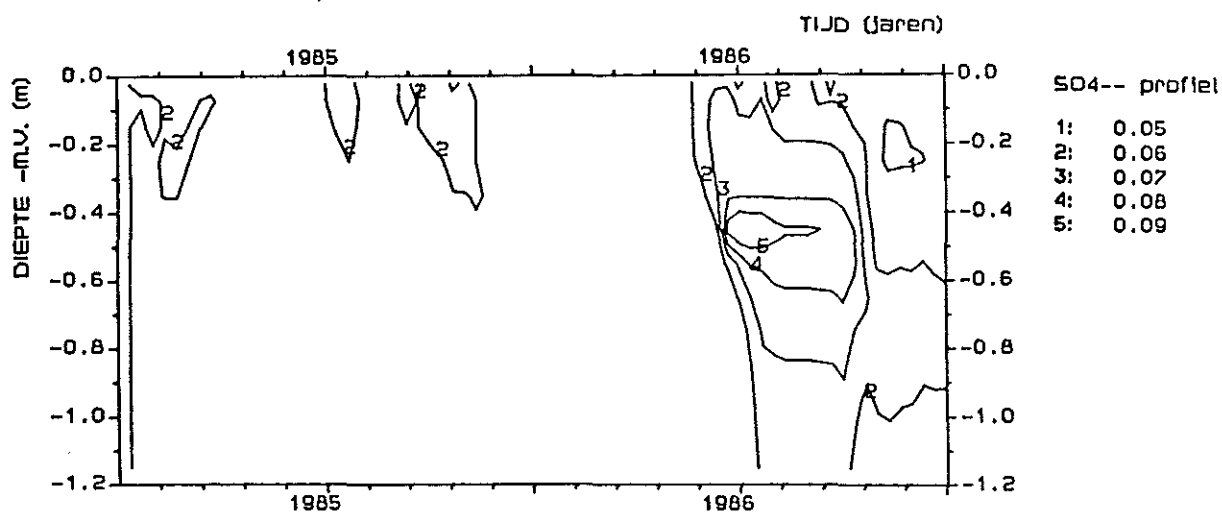


Fig. 36. Gesimuleerde SO_4^{--} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

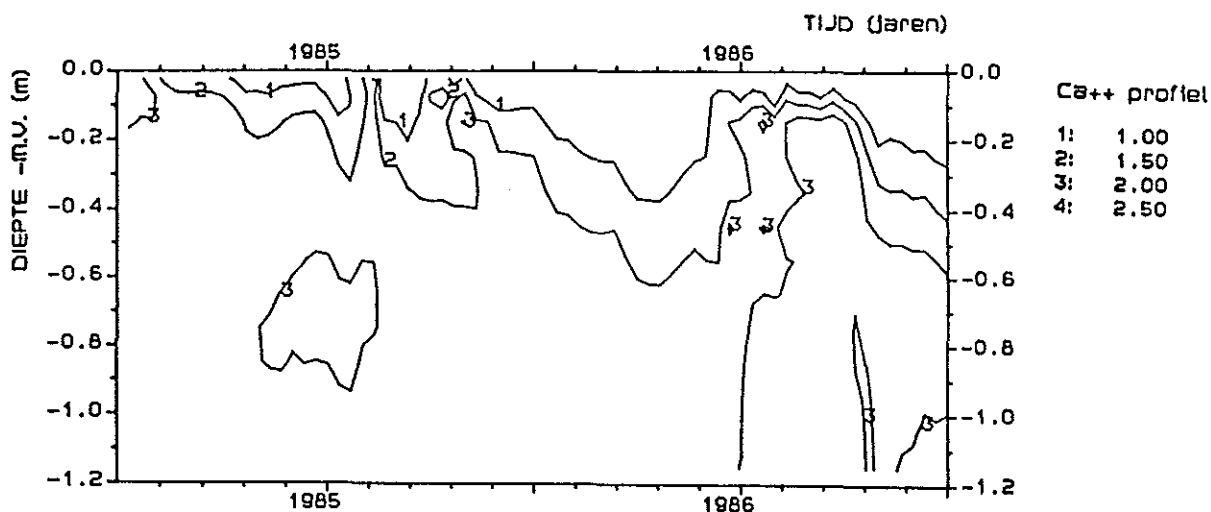


Fig. 37. Gesimuleerde Ca^{++} concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

Een andere, meer aannemelijke verklaring ligt in de CO_2 huishouding.

- * De onzekerheid van de HCO_3^- concentraties in het infiltrerende water.
- * De CO_2 produktie zoals die wordt berekend met het model ANIMO zal misschien groter zijn.
- * De inschatting van de diffusieparameters p_1 en p_2 (relatie (20)) kan foutief zijn. De bij deze berekeningen gebruikte waarde van p_2 bedraagt 2,5. De ervaring die is opgedaan met het model ANIMO, waarin eveneens dezelfde diffusieformulering is opgenomen, leert dat de waarde van p_2 voor zandgronden de waarde van 3,0 tot 3,5 kan aannemen. Een grotere waarde van p_2 vermindert de diffusiemogelijkheid in het bodemprofiel aanzienlijk waardoor er minder CO_2 aan het bodemsysteem kan ontsnappen.

* De waterhuishouding is gedeeltelijk gecalibreerd aan vochtgehaltes die zijn bepaald aan de hand van gamma-transmissie bepalingen. Door het gebruik van deze methode kunnen aanzienlijke meetfouten optreden. Eventuele fouten die in de vochtgehalteberekeningen zijn gemaakt zullen zich voortplanten in de berekende luchthuishouding.

Uit de vergelijking van de betreffende figuren blijkt dat de berekende HOC_3^- concentraties en P_{CO_2} waarden vooral in de winterperiode van '85-'86 te laag zijn. Dit sluit vooral aan op de mogelijkheid van onvolkomendheden in de beschrijving van het diffusieproces. Met name in het najaar, wanneer de luchtgehaltes laag zijn en het bodemprofiel bijna verzadigd is, is dit een kritiek proces.

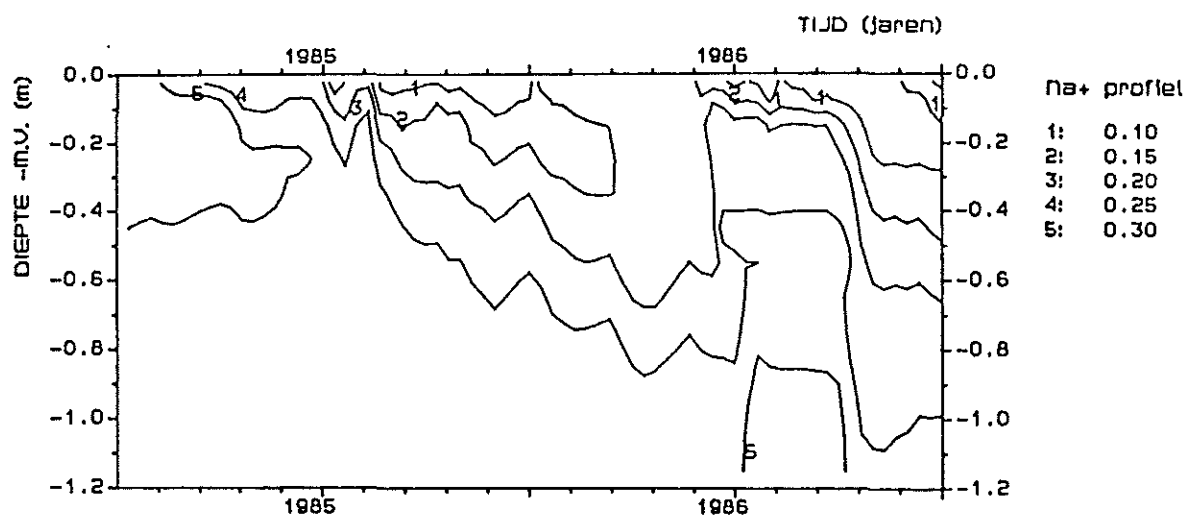


Fig. 38. Gesimuleerde Na^+ concentraties in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

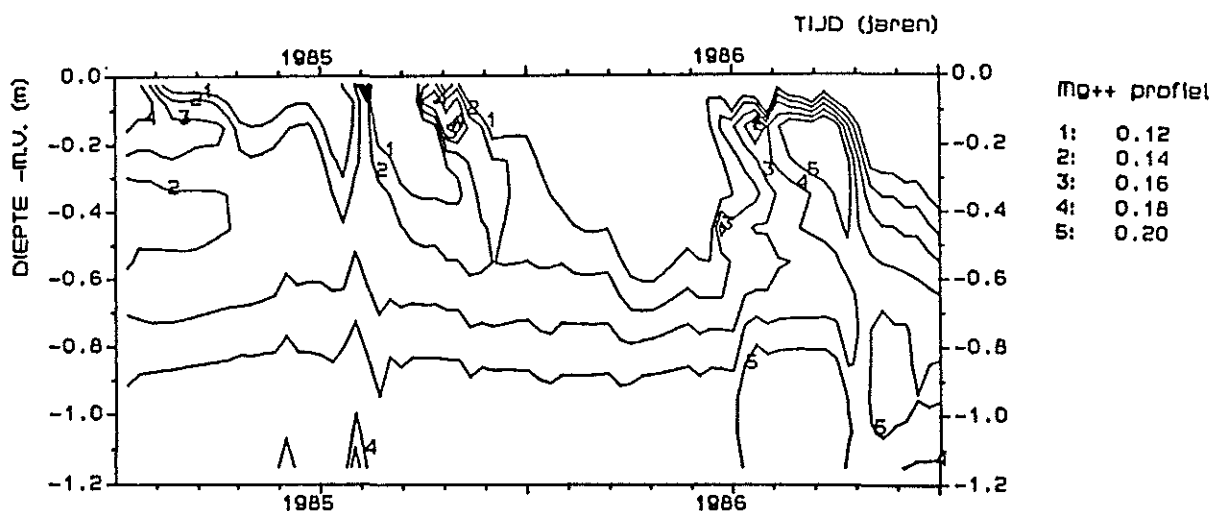


Fig. 39. Gesimuleerde Mg^{++} concentraties in de beekerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

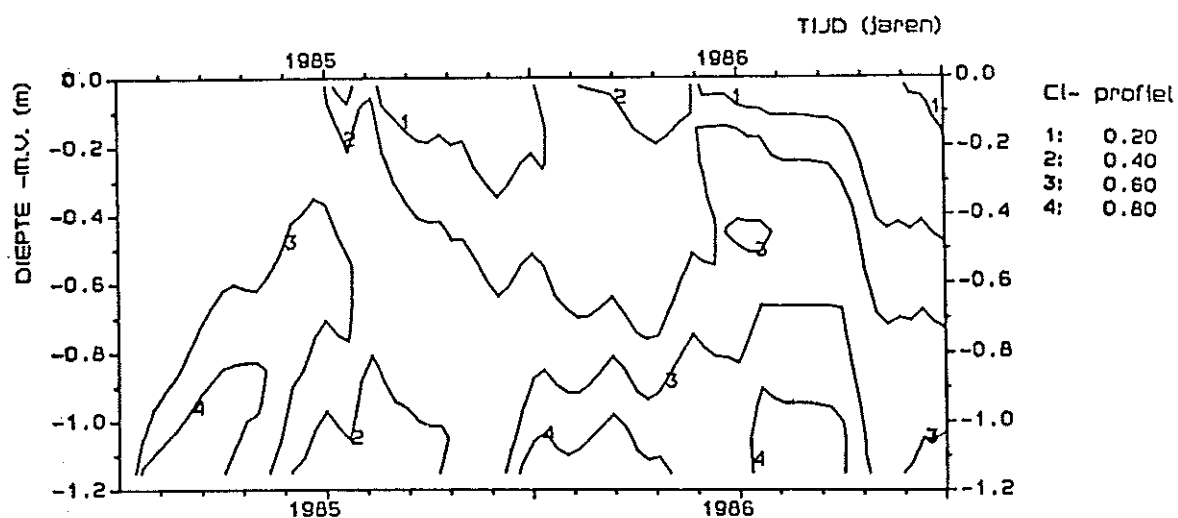


Fig. 40. Gesimuleerde Cl^- concentraties in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

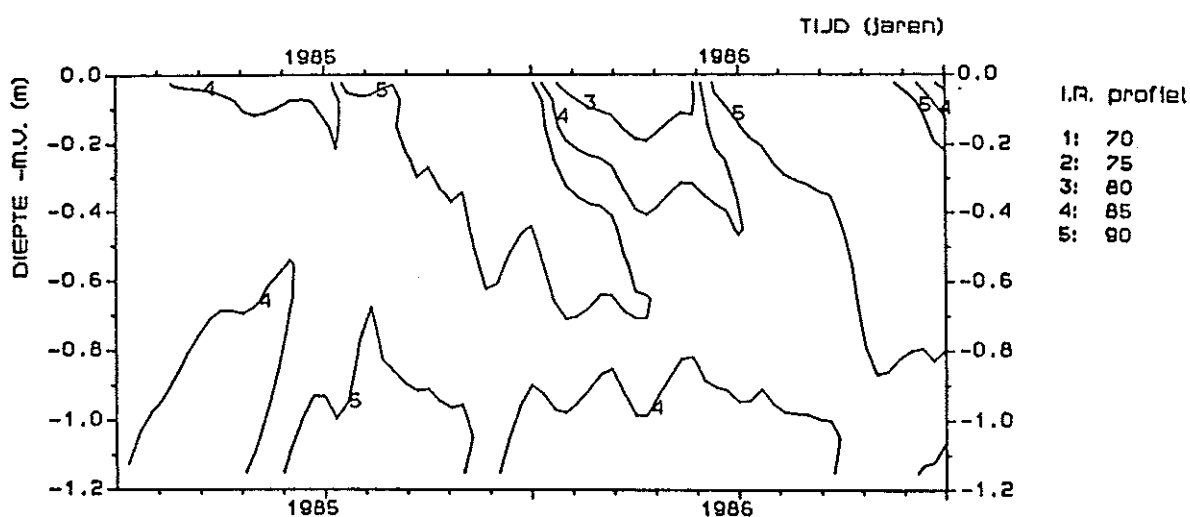


Fig. 41. Gesimuleerde Ionen Ratio's in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

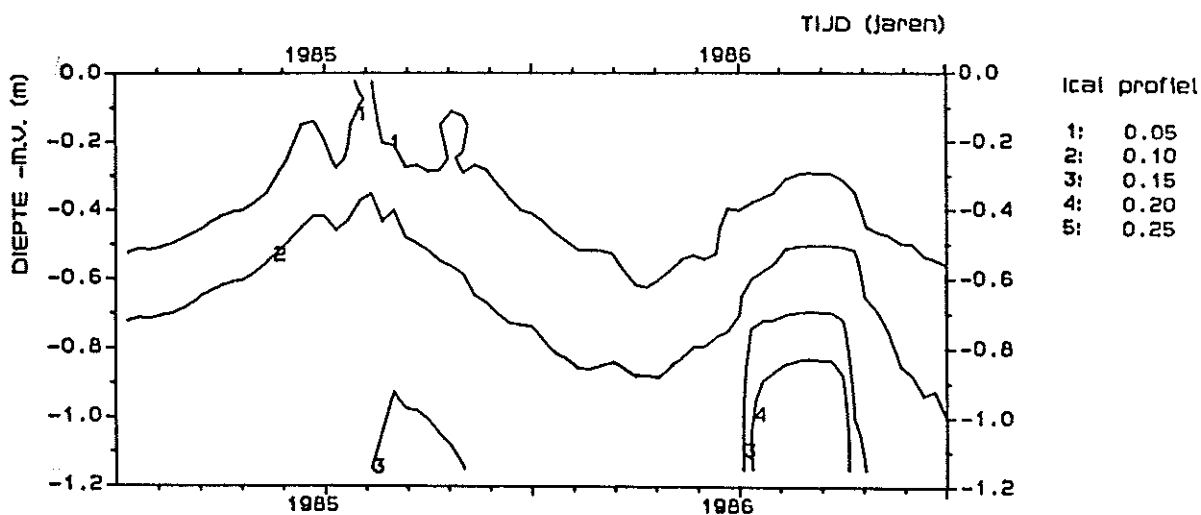


Fig. 42. Gesimuleerde CaCO_3 verzadigingsgraden in de beekeerdgrond van Groot Zandbrink, uitgezet tegen de tijd en tegen de diepte

6.3.3. Opmerkingen

Het gepresenteerde rekenvoorbeeld heeft gediend om de ontwikkelde modellen te testen. Tevens is de mogelijkheid om fysische, biologische en chemische processen met een dynamisch karakter in de wortelzone en onverzadigde zone te simuleren hiermee geïllustreerd.

Uit de verkregen resultaten blijkt dat de chemische formuleringen in het model goed voldoen.

De geschatte waarden voor de Vanselow selectiviteits constanten die zijn verkregen uit kolomexperimenten met bodemmateriaal uit een ander natuurgebied blijken in de berekeningen goed te voldoen. De waarde van de reactiesnelheid van calciëverwerking komt overeen met de reactiesnelheid van vers CaCO_3 . Bij de toepassing van het model in een ander gebied moet deze waarde wellicht worden aangepast.

Een juiste berekening van de water- en luchthuishouding is noodzakelijk om goede resultaten te verkrijgen bij:

- * De simulatie van het convectieve en dispersieve transport van stoffen in de waterfase.
- * de simulatie van het diffusieve transport van stoffen in de gasfase.

Een goede inschatting van de diffusieparameters p_1 en p_2 is eveneens noodzakelijk voor de berekening van de gasdiffusie.

Suggesties voor nadere verbeteringen en toepassingen:

- * Een nadere calibratie wordt wenselijk geacht gezien het verloop van de gesimuleerde PCO_2 , HCO_3^- en pH profielen. Hierbij kan worden gedacht aan een betere simulatie van de organische stofhuishouding met het model ANIMO.

Voor de toetsing van de ANIMO berekeningen is het wenselijk om de beschikking te hebben over meer meetgegevens van stikstofgehalten en NO_3^- en NH_4^+ concentraties over meerdere jaren. Eveneens zijn betere gegevens nodig van de bovengrondse en ondergrondse produktie van biomassa.

- * Meting van concentraties in stagnerend oppervlaktewater kunnen bijdragen tot een verbetering van de rekenresultaten.
- * Bij een eventuele gevoeligheidsanalyse dient men zich in eerste instantie te richten op de diffusieparameters p_1 en p_2 , de reactiesnelheid voor calciëterslag en calciëverwerking (KPRE en KSOL) en de adsorptie selectiviteitsconstanten.

- * Voor een betere fundering van uitspraken aan de hand van modelberekeningen met het in dit rapport gepresenteerde model is het wenselijk dat eerst een toetsing plaats vindt aan de hand van datasets uit meerdere gebieden.
- * In de berekeningen heeft de uitvoer van het model ANIMO gediend als invoer voor TRAWOS / EPIDIM (koppeling op afstand). Naar verwachting zal een directe koppeling tussen ANIMO en EPIDIM de kwaliteit van de rekenresultaten gunstig beïnvloeden.

LITERATUUR

- ABDEL KHALIK M.A. & F. BLOMER, 1984. COMPLEX, a computer program for solving chemical equilibria on the basis of activities. Report 2: Reuse of drainage water project. Institute for Land and Water Management Research, Wageningen, the Netherlands.
- AMHREIN, C., 1984. The effect of an Exchanger Phase, Carbon dioxide, and Mineralogy on the Rate of Geochemical Weathering. Ph.D. Thesis, Utah State University.
- BAKKER, J.W. & A.P. HIDDING, 1970. The influence of soil structure and air content on gas diffusion in soils, Neth. J. Agric. Sci. 18:37.
- , J.W., 1987. ICW rapport in voorbereiding.
- BELMANS, C., J.G. WESSELING & R.A. FEDDES, 1983. Simulation Model of the Water Balance of a Cropped Soil: SWATRE. Techn. Bull. 21, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- BERGHUIJS-VAN DIJK, J.T., 1985. WATBAL, A simple water balance model for a unsaturated/saturated soil profile, ICW nota 1670, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- , P.E. RIJTEMA & C.W.J. ROEST, 1985. ANIMO, Agricultural Nitrogen Model, ICW nota 1671, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- BESTEN, J.J. DEN, 1986. Berekeningsmethoden vochtleverantie en aëratie: evaluatie en bruikbaarheid simulatiemodellen, Rapport 8a, Studiecommissie Waterbeheer Natuur, Bos en Landschap.
- BOUTEN, W., F.M. DE VRÉ, J.M. VERSTRATEN & J.J.H.M. DUYSINGS, 1984. Carbon dioxide in the soil atmosphere: Simulation model parameter estimation from field measurements, in: Hydrochemical Balances of Freshwater Systems, IAHS-AISH Publication No.150, Uppsala.
- BRESLER, E., 1973. Simultaneous Transport of Solutes and Water under Transient Unsaturated Flow Conditions, Water Resources Research, Vol.9, No.4, pp 975-985.
- CAMPBELL, G.S., 1985. Soil Physics with Basic, Transport Models for Soil-Plant Systems, Development in Soil Science 14, Elsevier, Amsterdam.

- COATS & SMITH, 1964. Dead End Pore Volume and Dispersion in Porous Media, Soc. Pet. Eng. J. 4:73-84.
- CURRIE, J.A., 1965. Diffusion within soil microstructure: a structural parameter for soil, J. Soil Sci. 16:279-289.
- DRECHT, VAN G., 1984. Vertikaal transport van opgeloste stoffen in de onverzadigde zone, LBG 84-01, Rijkstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne.
- ERNST, L.F. & R.A. FEDDES, 1979. Invloed van grondwateronttrekking voor berekening en drinkwater op de grondwaterstand. ICW nota 1116, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- GLINSKI, J. & W. STEPNIIEWSKI, 1985. Soil Aeration and its Role for Plants, CRC Press, Inc., Florida.
- GRABLE, A.R., & E.G. SIEMER, Effects of bulk density, aggregate size, and water suction on oxygen diffusion, redox potentials, and elongation of corn roots, Soil Sci. Soc. Am. Proc., 32:180.
- GRADWELL M.W., 1961. Laboratory study of the diffusion of oxygen through pasture topsoil, N. Z. J. Agric. Res., 4:250.
- GROENENDIJK, P., 1987. Onderzoek naar de effecten van wateraanvoer en peilveranderingen in agrarische gebieden op de waterkwaliteit in natuurgebieden, deel 3: EPIDIM, een chemisch evenwichtsmodel met adsorptie, verwerking en neerslag van calcië, ICW nota 1774, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- HENDRIKS, R.F.A., 1986. Onderzoek naar de effecten van wateraanvoer en peilveranderingen in agrarische gebieden op de waterkwaliteit in natuurgebieden, deel 4: Enkele hydrologische, bodemfysische en bodemchemische parameters uit twee SWNBL proefgebieden, ICW nota 1743, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- JANSEN, P.C. & R.H. KEMMERS, 1980. Relaties tussen hydrologische parameters en enkele vegetatietypen van het C.R.M. reservaat 'Groot Zandbrink', ICW nota 1180, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- & R.H. KEMMERS, 1982. Aanvullingen betreffende de hydrologie van het C.R.M. reservaat 'Groot Zandbrink', vervolg op nota 1180, ICW nota 1326, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.

- JANSEN, P.C., 1986. De beworteling van (half-)natuurlijke vegetaties, ICW nota 1698, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- , 1986. De potentiële verdamping van (half-)natuurlijke vegetaties, ICW nota 1703, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- & R.H. KEMMERS, 1987. Mondelinge mededeling.
- KEMMERS, R.H. & P.C. JANSEN, 1985. Stikstofmineralisatie in onbemeste half-natuurlijke graslanden, ICW rapport 14, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- & P.C. JANSEN, 1987. Hydrochemistry of rich fen and water management, In: Proceedings Symposium Agrohydrology, Sept. 29th - Oct. 1st 1987 at IAC Wageningen, Department of Land and Water Use, Agricultural University, Wageningen.
- , 1987. Mondelinge mededeling.
- KNMI/RIVM, 1986. Chemische samenstelling van de neerslag over Nederland, Jaarrapport 1984. Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut, De Bilt en Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne, Bilthoven.
- KROES J.G., 1987. ANIMO: ANIMO (Agricultural Nitrogen Model), User's guide, ICW nota in voorbereiding.
- , 1988. WATBAL: user's manual and applications, ICW nota in voorbereiding.
- LANGMUIR, D., 1986. Physical and Chemical Characteristics of Carbonate Water, in: Guide to the Hydrology of Carbonate Rocks, Studies and Reports in Hydrology 41, UNESCO, Paris.
- MANKOR, J. & R.H. KEMMERS, 1987. ECONUM, een model voor de simulatie van de stikstof- en fosfaathuishouding op vochtige standplaatsen met half-natuurlijke vegetaties, ICW rapport in voorbereiding.
- RITSEMA C.J. 1986. The development and behaviour of (potential) acid sulfate soils. ICW nota 1739, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- SALLAM, A., W.A. JURY & J. LETEY 1984. Measurement of gas diffusion coefficient under relatively low air-filled porosity, Soil Sci. Soc. Am. J. 48:3-6.

- STUMM, W. & MORGAN, J.J., 1970. Aquatic Chemistry, Wiley Interscience, New York.
- SAUER, R.H., 1978. A Simulation Model for Grassland Primary Producer Phenology and Biomass Dynamics, in: Grassland Simulation Model, pp 55-87, Ecological Studies 26, Springer-Verlag, New York.
- TOORN, A. VAN DEN, & J. PANKOW (1987). Onderzoek naar de effecten van wateraanvoer en peilveranderingen in agrarische gebieden op de waterkwaliteit in natuurgebieden, deel 6: In 1986 bepaalde waterkwantiteits- en waterkwaliteitsparameters in de 2 SWNBL proefgebieden. ICW nota 1787, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.

APPENDIX I

Tabel 3. Waarden van een aantal parameters die bij de WATBAL berekeningen zijn gebruikt.

	Tondense heide		Groot Zandbrink	
ALPHAS	0,60		0,80	
ALPHAW	0,60		0,65	
TIYR(1-8) en	0, 0,5		0, 1,0	
SOCYR(1-8)	121, 0,5		121, 1,0	
	152, 0,6		152, 1,0	
	165, 0,7		165, 1,0	
	213, 1,0		213, 1,0	
	244, 1,0		244, 1,0	
	290, 0,7		290, 1,0	
	360, 0,5		360, 1,0	
WP1 en WP2	0,275 0,145		0,49 0,32	
FC1 en FC2	0,36 0,21		0,57 0,34	
SAT1 en SAT2	0,44 0,27		0,63 0,36	
D1 en LG	0,20 3,00		0,10 1,20	
TFIX	10,1458		10,1458	
EXIS(1-4)	1 1 1 0		1 0 0 1	
HD(1-4)	0,0		0,75	
	-3,50		1,02*	
	2,06		1,02*	
	2,75*		1,02	
INF(2-4)	0 0 0		0 0 0	
OME(2-4)	0,2 0,5 1,0*		10,* 10,* 10,	
L(2-4)	8000,0		6,0*	
	250,0		6,0*	
	70,0*		6,0	
D(2-4)	8,0 3,0 1,0*		0,2* 0,2* 0,2	
K(2-4)	15,0 5,3 0,5*		0,5* 1,5* 0,5	
RES(1)	70,0		10,0	
K1	0,5		1,8	
STEPSTART	1		1	
YST	1975		1975	
STEPEND	36		36	
YEND	1986		1986	
VOL1	0,087		0,0629	
DVOL2	2,80		1,10	
VOL2	0,756		0,396	
Z	0,9		0,605	
CO1	0,7656		0,7656	
CO2	0,6413		0,6413	

Waarden met aansluitend een * erachter kunnen beschouwd worden als dummy

APPENDIX II

Tabel 4. Waarden van een aantal parameters die bij de SWATRE berekeningen zijn gebruikt ten behoeve van simulaties van de waterhuishouding van de veldpodzollocatie in de Tondense heide

CODE(1-9)	3 0 0 1 2 0 1 0 0
L(1-5)	1 360 28 1 1
TINIT	90,
TEND	330,
DTMI	0,5
DTHM	0,010
CGWLAM	1,0
NPR	8
TPR(1-NPR)	30 30 30 30 30 30 30 30
IRER en INL	0 0
ARER en BRER	0 0
RNAM	0
TB en TE	365 366
PO en PU1	-10 -25
PL1 en P2H	-25 -200
P2L en P2	-800 -400
P3	-8000
FLA,FLB,FLC	2,6 1,5 0,9
DRZA	20
DSP en NPL	160 2
NCS	40
NC(1-2)	5 40
ISD	5
LV(1-2)	0,03 0,03
MV(1-2)	0,44 0,27
PRH(1,1-42)	562341 295120 154881 87096 48977 32359 20417 12882 8128 5248 3890 2691 2089 1621 1288 1047 812 645 512 467 371 309 269 229 195 170 151 135 123 115 104 93 81 72 64 55 43 37 32 21 9 0
CON(1,1-42)	2,0E-07 7,0E-07 2,2E-06 5,9E-06 0,162E-04 0,335E-04 0,751E-04 0,168E-03 0,376E-03 0,81E-03 0,137E-02 0,26E-02 0,41E-02 0,63E-02 0,946E-02 0,136E-01 0,212E-01 0,317E-01 0,457E-01 0,558E-01 0,835E-01 0,115 0,146 0,194 0,257 0,327 0,403 0,489 0,576 0,648 0,773 0,94 1,197 1,47 1,808 2,357 3,626 4,717 6,082 12,71 55,99 187,6
PRH(2,1-25)	100000 52480 15848 8709 1071 575 436 251 204 182 158 148 135 123 115 105 93 81 68 56 44 32 18 7 0
CON(2,1-25)	0,1E-06 0,5E-06 0,6E-05 0,214E-04 0,178E-02 0,66E-02 0,119E-01 0,38E-01 0,589E-01 0,749E-01 0,101 0,1159 0,141 0,171 0,197 0,239 0,309 0,413 0,598 0,9 1,498 2,933 9,876 72,45 257,2
GWLA\	13,0
AREL en BREL	-0,1950 -0,0167

Tabel 5. Waarden van een aantal parameters die bij de SWATRE berekeningen zijn gebruikt ten behoeve van simulaties van de waterhuishouding van de beekeerdgrond in Groot Zandbrink

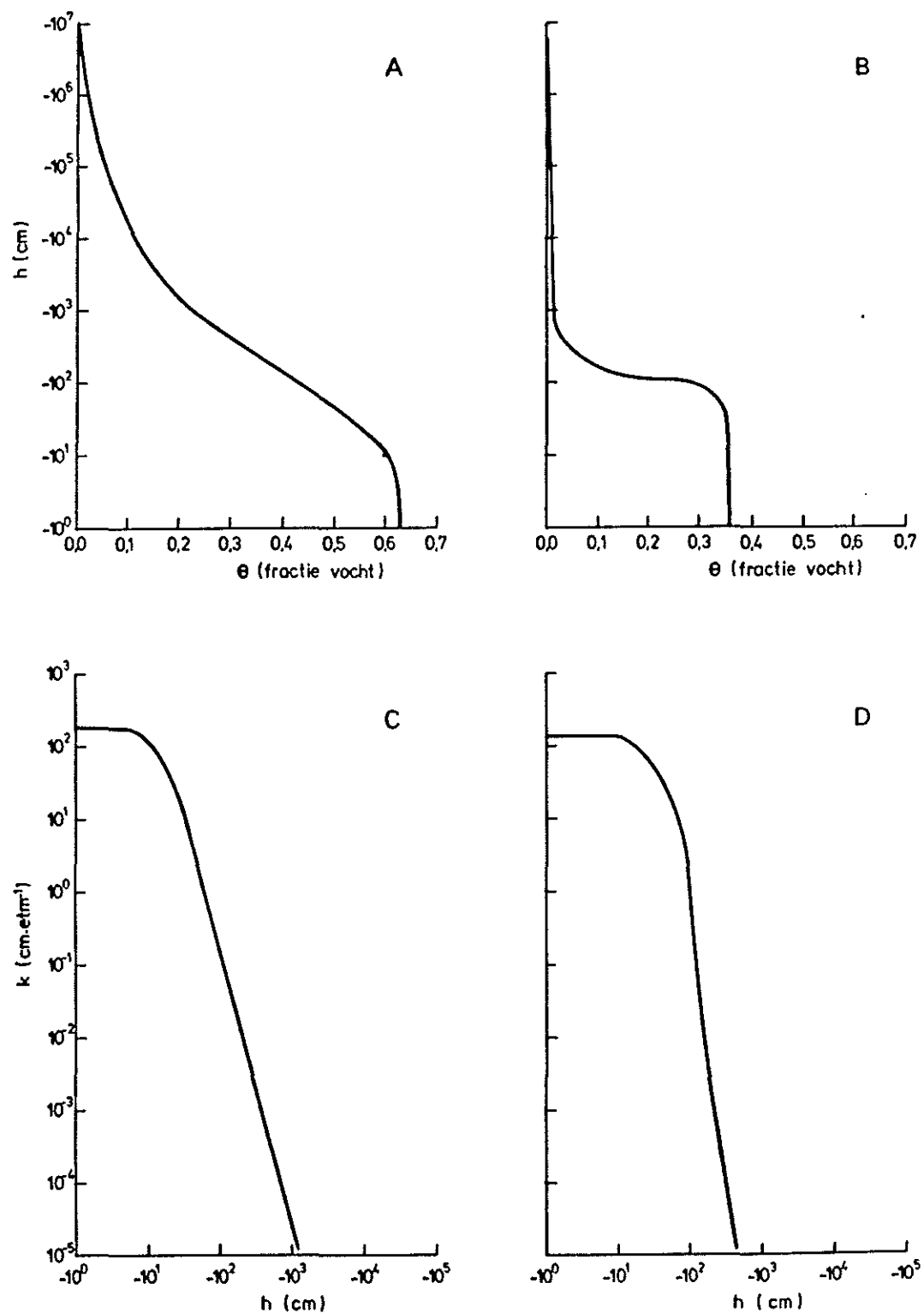
CODE(1-9)	0	1	0	1	2	0	1	0	0
L(1-5)	1	360	28	1	1				
TINIT	143,								
TEND	303,								
DTMI	0,2								
DTHM	0,005								
CGWLAM	0,5								
NPR	6								
TPR(1-NPR)	7	30	30	30	30	30			
IRER en INL	0	0							
ARER en BRER	0	0							
RNAM	0								
TB en TE	365	366							
PO en PU1	-10	-25							
PL1 en P2H	-25	-200							
P2L en P2	-800	-400							
P3	-8000								
FLA,FLB,FLC	2,6	1,5	0,9						
DRZA	10								
DSP en NPL	100	2							
NCS	40								
NC(1-2)	4	40							
ISD	4								
LV(1-2)	0,04	0,01							
MV(1-2)	0,63	0,36							
PRH(1,1-60)	630957	199526	141253	79433	50119	32359	25119	15849	
	13183	8913	7079	5012	4467	3162	2512	2113	1778
	1413	1122	1000	891	794	708	631	562	501
	316	282	251	237	224	200	188	178	158
	89	79	71	63	50	45	40	35	32
	27	24	21	18	15	10	6	0	
CON(2,1-60)	1,0E-21	1,0E-20	1,0E-19	1,0E-18	1,0E-17	1,0E-16	1,0E-15		
	1,0E-14	1,0E-13	1,0E-12	1,0E-11	1,0E-10	1,0E-09	1,0E-08		
	1,0E-07	1,0E-06	1,0E-05	0,2E-04	0,4E-04	0,5E-04	0,6E-04		
	0,7E-04	0,8E-04	0,9E-04	1,0E-04	1,07E-04	1,12E-04			
	1,2E-04	0,00032	0,00056	0,00079	0,0016	0,0028	0,0040		
	0,0056	0,01	0,014	0,022	0,032	0,045	0,071	0,10	0,158
	0,25	0,35	0,56	1,0	1,78	3,16	5,62	7,10	12,6
	44,67	56,23	70,79	100,0	125,9	177,83			
PRH(2,1-36)	25119	562	446	316	282	237	211	188	167
	142	138	134	130	126	122	118	114	110
	94	91	89	79	71	63	50	35	0
CON(2,1-36)	1,0E-10	1,0E-05	5,0E-05	1,0E-04	5,0E-04	8,0E-04	2,0E-03		
	5,0E-03	8,0E-03	1,0E-02	0,016	0,022	0,032	0,040	0,063	
	0,10	0,12	0,20	0,25	0,40	0,56	0,79	1,0	1,26
	2,40	2,82	3,20	3,60	4,00	4,47	7,94	22,38	56,23
	158,49								

Tabel 5. Vervolg

GWL(143-303)	-9,0	-11,0	-13,0	-15,0	-17,0	-19,0	-21,0	-23,0	-25,0
	-27,0	-28,2	-29,4	-30,6	-31,8	-33,0	-34,2	-35,4	-36,6
	-37,8	-39,0	-40,2	-41,4	-42,6	-43,8	-45,0	-46,2	-47,4
	-48,6	-49,8	-51,0	-52,6	-54,2	-55,8	-57,4	-59,0	-60,6
	-62,2	-63,8	-65,4	-67,0	-68,6	-70,2	-71,8	-73,4	-75,0
	-76,6	-78,2	-79,8	-81,4	-83,0	-82,8	-82,6	-82,4	-82,2
	-82,0	-81,8	-81,6	-81,4	-81,2	-81,0	-80,6	-80,2	-79,8
	-79,4	-79,0	-78,6	-78,2	-77,8	-77,4	-77,0	-76,7	-76,4
	-76,1	-75,8	-75,5	-75,2	-74,9	-74,6	-74,3	-74,0	-74,0
	-74,0	-74,0	-74,0	-74,0	-74,0	-74,0	-74,0	-74,0	-74,0
	-74,0	-74,1	-74,2	-74,3	-74,4	-74,5	-74,6	-74,7	-74,8
	-74,9	-75,0	-75,1	-75,2	-75,3	-75,4	-75,5	-75,6	-75,7
	-75,8	-75,9	-76,0	-76,3	-76,6	-76,9	-77,2	-77,5	-77,8
	-78,1	-78,4	-78,7	-79,0	-79,2	-79,4	-79,6	-79,8	-80,0
	-80,2	-80,4	-80,6	-80,8	-81,0	-79,2	-77,4	-75,6	-73,8
	-72,0	-70,2	-68,4	-66,6	-64,8	-63,4	-61,8	-60,2	-57,4
	-54,6	-51,8	-49,0	-46,2	-43,4	-40,6	-37,8	-35,0	-32,2
	-29,4	-26,6	-23,8	-21,0	-18,2	-15,4	-12,6	-9,8	

APPENDIX III

In het laboratorium bepaalde pF en k- θ relaties voor de wortelzone en ondergrond van de beekeerdgrond in Groot Zandbrink



A: pF curve wortelzone

B: pF curve ondergrond

C: k-h relatie wortelzone

D: k-h relatie ondergrond

APPENDIX IV

Waarden van een aantal parameters die bij de ANIMO berekeningen zijn gebruikt.

Tabel 6. Algemene invoergegevens ten behoeve van berekeningen met ANIMO voor de beekeerdgrond in Groot Zandbrink

maximum produktie bovengrondse delen	2000,0	kg ds ha ⁻¹ yr ⁻¹
"shoot production rate"	2,3	
"turnover time" van de wortels	0,0055	d ⁻¹
atmosferische droge depositie	25,0	kg N ha ⁻¹ yr ⁻¹
NH ₄ concentratie in neerslag	0,00126	kg N m ⁻³
NO ₃ concentratie in neerslag	0,00067	kg N m ⁻³
humus fractie van vers org. materiaal	75,0	%
stikstof fractie in exudaten	2,5	%
stikstof fractie in humus	4,8	%
stikstof fracties in vers org. materiaal		
fractie 1:	7,0	%
fractie 2:	5,0	%
fractie 3:	1,0	%
fractie 4:	0,5	%
fractie 5:	0,5	%
fractie 6:	0,0	%
fractie 7:	0,0	%
fractie 8:	1,0	%
fractie 9:	1,0	%
fractie 10:	1,0	%
gemiddelde afbraaksnelheid voor exudaten	365,0	yr ⁻¹
gemiddelde afbraaksnelheid voor humus	0,025	yr ⁻¹
gem. afbr.snelh. van vers org.materiaal		
fractie 1:	1,0	yr ⁻¹
fractie 2:	0,6	yr ⁻¹
fractie 3:	0,1	yr ⁻¹
fractie 4:	2,0	yr ⁻¹
fractie 5:	1,0	yr ⁻¹
fractie 6:	0,0	yr ⁻¹
fractie 7:	0,0	yr ⁻¹
fractie 8:	0,0	yr ⁻¹
fractie 9:	2,0	yr ⁻¹
fractie 10:	1,0	yr ⁻¹
gem. afbr.snelheid voor org.mat. in opl.	30,	yr ⁻¹
gemiddelde nitrificatiesnelheid	365,	yr ⁻¹
assimilatie factor	0,25	
distributieverh. ammonium in de wortelzone	3,0	
distributieverh. amm. onder de wortelzone	2,0	
gas diffusie parameter: p1	0,75	
gas diffusie parameter: p2	2,5	
pH-H ₂ O wortelzone	6,4	
pH-H ₂ O ondergrond	6,5	

APPENDIX V

Beschrijving van de invoer voor het computerprogramma TRAWOS

	lw : liter water;	ls : liter soil
	* : new record	
	** : new record for every soil layer	
	reading from file: 'CO2IN.DAT'; UNIT NUMBER = 31	
	options:	(will be read once)
	symbol	description
*	LOGUNIT	unitnumber for writing of logfile 'LOG_CO2.OUT'; if LOGUNIT = 5 information will be written to screen
	IOPTSIM	option parameter for contineous simulation IOPTSIM = 1 time dependent values will be read only for the first timestep
	IOPTADS	option parameter for the type of adsorption system that will be used IOPTADS = 1 (Na ⁺ , Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ : Vanselow) IOPTADS = 2 (Na ⁺ , Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ : Gapon/Kerr) IOPTADS = 3 (Na ⁺ , Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ , H ⁺ : Vanselow) IOPTADS = 4 (Na ⁺ , Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ , H ⁺ : Gapon/Kerr)
	IOPTPREC	option parameter for the type of precipitation system that will be used IOPTPREC = 0 (precipitation according to 0-order reaction) IOPTPREC = 1 (precipitation according to 1-order reaction) IOPTPREC = 2 (precipitation according to momentaneous reaction)
	IWRDEL	writing of general results with an interval of IWRDEL timesteps
*	IOPTPR(1:5)	option parameter for writing of extended information of the chemical system IOPTPR(1) = 1 of initial concentrations IOPTPR(2) = 1 of upper boundary concentrations IOPTPR(3) = 1 of lower boundary concentrations IOPTPR(4) = 1 of mobile phase concentrations IOPTPR(5) = 1 of immobile phase concentrations
*	IOPTBAL(1:7)	option parameters for writing of mass balances before and after the transport routine IOPTBAL(1) = 1 balances of H ⁺ IOPTBAL(2) = 1 balances of Na ⁺ IOPTBAL(3) = 1 balances of Ca ⁺⁺ IOPTBAL(4) = 1 balances of Mg ⁺⁺ IOPTBAL(5) = 1 balances of CO ₂ IOPTBAL(6) = 1 balances of Cl ⁻ and SO ₄ ⁻⁻ IOPTBAL(7) = 1 balances of calcite

time independent system parameters: (will be read once)		
symbol	description	unit
* NLAY	number of layers	(-)
NSTEP	number of timesteps	(-)
DLT	length of timestep	(day)
ALFA	exchange coefficient between mobile and immobile phase	(day ⁻¹)
P1	diff. parameter (gas fraction multiplier)	(-)
P2	diff. parameter (gas fraction exponent)	(-)
SK(1:3)	sorption exchange constants	
	if IOPTADS = 1	
	SK(1) = Na ⁺ /Ca ⁺⁺ Vanselow exchange const. (lw/mol)	
	SK(2) = Ca ⁺⁺ /Mg ⁺⁺ Vanselow exchange const. (-)	
	SK(3) = dummy	(-)
	if IOPTADS = 2	
	SK(1) = Na ⁺ /Ca ⁺⁺ Gapon exchange const. (lw/mol) ^{0.5}	
	SK(2) = Ca ⁺⁺ /Mg ⁺⁺ Kerr exchange const. (-)	
	SK(3) = dummy	(-)
	if IOPTADS = 3	
	SK(1) = Na ⁺ /H ⁺ Vanselow exchange const. (-)	
	SK(2) = Ca ⁺⁺ /H ⁺ Vanselow exchange const. (mol/lw)	
	SK(3) = Mg ⁺⁺ /H ⁺ Vanselow exchange const. (mol/lw)	
	if IOPTADS = 4	
	SK(1) = H ⁺ /Ca ⁺⁺ Gapon exchange const. (lw/mol) ^{0.5}	
	SK(2) = Na ⁺ /Ca ⁺⁺ Gapon exchange const. (lw/mol) ^{0.5}	
	SK(3) = Mg ⁺⁺ /Ca ⁺⁺ Kerr exchange const. (-)	
KPRE	reaction coefficient for CaCO ₃ precipitation	
	if IOPTPRE = 0	(mol/lw/day)
	if IOPTPRE = 1	(day ⁻¹)
	dummy if IOPTPRE = 2	(-)
KSOL	reaction coefficient for CaCO ₃ dissolution	(day ⁻¹)
OVERSAT	oversaturation treshhold (is multiplied by the solubility product of CaCO ₃)	(-)
* DZL(1:NLAY)	layer thickness	(m)
DISPL(1:NLAY)	dispersion length	(m)
CECL(1:NLAY)	Cation Exchange Capacity	(meq/100gr)
RHODL(1:NLAY)	dry bulkdensity	(kg/l)
POR(1:NLAY)	porosity	(-)
THETIM(1:NLAY)	immobile moisture fraction	(-)

initial values:		(will be read once)	
	symbol	description	unit
*	THETINIT(1:NLAY)	initial moisture fraction	(-)
	PCO2INIT(1:NLAY)	initial CO ₂ pressure	(bar)
	TEMPINIT(1:NLAY)	initial temperature	(deg C)
**	CINIT(1:8,1:NLAY)	initial concentrations	(mol/lw)
		CINIT(1, LN) : Na ⁺	(mol/lw)
		CINIT(2, LN) : Ca ⁺⁺	(mol/lw)
		CINIT(3, LN) : Mg ⁺⁺	(mol/lw)
		CINIT(4, LN) : Cl ⁻	(mol/lw)
		CINIT(5, LN) : HCO ₃ ⁻	(mol/lw)
		CINIT(6, LN) : dummy	(-)
		CINIT(7, LN) : SO ₄ ⁻	(mol/lw)
*		CINIT(8, LN) : pH	(-)
	CUMCAL(1:NLAY)	CaCO ₃ stock per layer	(mol/lw)

reading from file: 'CRAIN.DAT'; UNIT NUMBER = 32 (will be read every timestep if IOPTSIM ≠ 1)		
symbol	description	unit
* CRAIN(1:8)	concentrations of water at upper boundary	
	CRAIN(1) : Na ⁺	(mol/lw)
	CRAIN(2) : Ca ⁺⁺	(mol/lw)
	CRAIN(3) : Mg ⁺⁺	(mol/lw)
	CRAIN(4) : Cl ⁻	(mol/lw)
	CRAIN(5) : dummy	(-)
	CRAIN(6) : CO ₂ pressure	(bar)
	CRAIN(7) : SO ₄ ⁻	(mol/lw)
	CRAIN(8) : pH	(-)
reading from file: 'CSEEP.DAT'; UNIT NUMBER = 33 (will be read every timestep if IOPTSIM ≠ 1)		
symbol	description	unit
* CSEEP(1:8)	concentration of water at lower boundary	
	CSEEP(1) : Na ⁺	(mol/lw)
	CSEEP(2) : Ca ⁺⁺	(mol/lw)
	CSEEP(3) : Mg ⁺⁺	(mol/lw)
	CSEEP(4) : Cl ⁻	(mol/lw)
	CSEEP(5) : HCO ₃ ⁻	(mol/lw)
	CSEEP(6) : dummy	(-)
	CSEEP(7) : SO ₄ ⁻	(mol/lw)
	CSEEP(8) : pH	(-)
reading from (unformatted) file: 'CO2T.DAT'; UNIT NUMBER = 34 (will be read every timestep if IOPTSIM ≠ 1)		
symbol	description	unit
* THEMOIS(1:NLAY)	moisture fraction per layer	(-)
* FLUX(1:NLAY+1)	flux at layer boundaries	(m/day)
* TEMP(1:NLAY)	temperature per layer	(deg C)
* PRES(1:NLAY)	pressure	(bar)
* PROC(1:NLAY)	CO ₂ production	(mol/lw/day)
* PROH(1:NLAY)	nett H ⁺ production	(mol/lw/day)

Tabel 7. Schatting van de initiële hoeveelheid exudaten (EX) en humus afkomstig van exudaten (HUEX) per bodemlaag in kg.m^{-2}

	cm-mv	EX	HUEX
laag 1	0- 5	0,0	2,32
laag 2	5-10	0,0	2,32
laag 3	10-20	0,0	2,64
laag 4	20-30	0,0	0,77
laag 5	30-40	0,0	0,69
laag 6	40-50	0,0	0,60
laag 7	50-60	0,0	0,60
laag 8	60-70	0,0	0,45
laag 9	70-80	0,0	0,45
laag 10	80-90	0,0	0,36
laag 11	90-100	0,0	0,36
laag 12	100-110	0,0	0,36
laag 13	110-120	0,0	0,36

Tabel 8a. Schatting van de initiële hoeveelheid vers organisch materiaal per fractie in kg.m^{-2}

[illegible]

Tabel 8b. Schatting van de initiele hoeveelheid humus afkomstig van vers organisch materiaal per fraktie in kg.m^{-2}

[illegible]

APPENDIX VIa

Ingevoerde concentraties zoals die vermeld staan in de file CRAIN.DAT

Periode I heeft betrekking op:

decade 1 t/m 18;
decade 21 en 22;
decade 33 t/m 49;
decade 68 t/m 72;

Periode II heeft betrekking op:

decade 19 en 20;
decade 23 t/m 32;
decade 50 t/m 67;

Periode	Na^+	Ca^{++}	Mg^{++}	Cl^-	HCO_3^-	P_{CO_2}	SO_4^{--}	pH
I	2,0E-4	7,4E-4	0,9E-4	4,1E-4	0,	0,11	0,6E-4	6,3
II	7,7E-5	2,4E-3	1,8E-5	9,0E-5	0,	0,302E-2	0,6E-4	4,46

APPENDIX VIb

Ingevoerde concentraties zoals die vermeld staan in de file CSEEP.DAT

decade	Na ⁺	Ca ⁺⁺	Mg ⁺⁺	Cl ⁻	HCO ₃ ⁻	P _{CO2}	SO ₄ ⁻⁻	pH
1	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
2	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
3	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
4	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
5	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
6	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
7	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
8	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
9	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
10	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,6E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
11	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
12	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
13	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
14	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
15	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	3,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
16	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	3,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
17	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	2,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
18	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	2,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
19	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	2,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
20	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	3,0E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
21	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	3,2E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
22	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	3,6E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
23	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	3,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
25	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,0E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
26	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
27	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
28	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
29	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
30	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
31	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,0E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
32	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
33	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,7E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
34	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,0E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
35	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,2E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
36	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
37	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
38	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
39	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
40	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
41	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
42	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
43	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
44	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,7E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
45	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
46	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
47	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7

decade	Na ⁺	Ca ⁺⁺	Mg ⁺⁺	Cl ⁻	HCO ₃ ⁻	P _{CO₂}	SO ₄ ⁻⁻	pH
48	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,6E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
49	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
50	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,9E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
51	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
52	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
53	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
54	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
55	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
56	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
57	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
58	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
59	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,2E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
60	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
61	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,4E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
62	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
63	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	4,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
64	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,1E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
65	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
66	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	5,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
67	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
68	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	6,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
69	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,3E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
70	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	7,8E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
71	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	8,5E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7
72	2,8E-4	2,0E-3	1,3E-4	9,0E-4	3,5E-03	0,	0,5E-4	6,7

APPENDIX VII

Gegevens zoals die staan vermeld in de file CO2IN.DAT en zoals die zijn gebruikt bij de TRAWOS / EPIDIM berekeningen.

LOGUNIT	3									
IOPTSIM	0									
IOPTADS	3									
IOPTPREC	1									
IWRDEL	180									
IOPTPR(1-5)	0	0	0	0	0					
IOPTBAL(1-7)	0	0	0	0	0	0	0			
NLAY	13									
NSTEP	360									
DLT	10,145833									
ALFA	0,005									
P1	0,75									
P2	2,50									
SK(1:3)	0,8E-04	0,3E-07	1,5E-06							
KPRE	1,0E-06									
KSOL	1,0E-04									
OVERSAT	20,									
DZL(1:13)	0,05	0,05	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
	0,1	0,1	0,1	0,1						
DISPL(1:13)	0,015	0,015	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025
	0,025	0,025	0,025	0,025						
CECL(1:13)	18,0	12,8	8,1	3,7	3,5	3,3	3,3	3,0	3,0	
	2,7	2,7	2,7	2,7						
RHODL(1:13)	0,92	1,00	1,60	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67
	1,67	1,67	1,67	1,67						
POR(1:13)	0,63	0,63	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36
	0,36	0,36	0,63	0,63						
THETIM(1:13)	0,05	0,05	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
	0,01	0,01	0,01	0,01						
THETINIT(1:13)	0,63	0,63	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36	0,36
	0,36	0,36	0,36	0,36						
PCO2INIT(1:13)	0,024	0,024	0,024	0,023	0,022	0,022	0,022	0,021	0,020	
	0,019	0,018	0,018	0,018						
TEMPINIT(1:13)	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
	1,0	1,0	1,0	1,0						
CINIT(1,1:8)	4,0E-4	2,14E-3	1,95E-4	5,20E-4	4,88E-3	0,024	6,E-5	6,35		
CINIT(2,1:8)	4,0E-4	2,14E-3	1,95E-4	5,20E-4	4,88E-3	0,024	6,E-5	6,35		
CINIT(3,1:8)	3,7E-4	2,05E-3	1,82E-4	5,10E-4	4,93E-3	0,024	6,E-5	6,40		
CINIT(4,1:8)	3,3E-4	1,75E-3	1,54E-4	4,50E-4	4,98E-3	0,023	6,E-5	6,40		
CINIT(5,1:8)	3,1E-4	1,50E-3	1,25E-4	4,30E-4	5,10E-3	0,022	6,E-5	6,40		
CINIT(6,1:8)	3,0E-4	1,60E-3	1,28E-4	4,25E-4	5,43E-3	0,022	6,E-5	6,47		
CINIT(7,1:8)	2,9E-4	1,75E-3	1,37E-4	4,20E-4	5,80E-3	0,022	6,E-5	6,54		
CINIY(8,1:8)	2,8E-4	1,94E-3	1,56E-4	4,28E-4	6,20E-3	0,021	6,E-5	6,61		
CINIT(9,1:8)	2,8E-4	1,92E-3	1,63E-4	4,46E-4	6,15E-3	0,020	6,E-5	6,70		
CINIT(10,1:8)	2,8E-4	1,87E-3	1,70E-4	4,62E-4	6,05E-3	0,019	6,E-5	6,78		
CINIT(11,1:8)	2,8E-4	1,85E-3	1,86E-4	4,56E-4	6,00E-3	0,018	6,E-5	6,80		
CINIT(12,1:8)	2,7E-4	1,85E-3	1,87E-4	4,46E-4	5,93E-3	0,018	6,E-5	6,80		
CINIT(13,1:8)	2,7E-4	1,88E-3	1,89E-4	4,38E-4	5,88E-3	0,018	6,E-5	6,80		
CUMCAL(1:13)	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
	0,02	0,02	0,02	0,02						

1. The first part of the document is a list of names and addresses of the members of the committee. The names are listed in alphabetical order, and the addresses are listed below each name. The list includes the names of the members of the committee, the names of the members of the sub-committee, and the names of the members of the advisory committee. The addresses are listed in the same order as the names.