

ANIMO-RT3D 1.0
On-line koppeling van ANIMO en
RT3D voor dynamische modellering
van nutriëntentransport op
regionale schaal

2008-U-R1289/A

Gijs Janssen
Bas van der Grift
Jasper Griffioen
Piet Groenendijk



Titel

ANIMO-RT3D 1.0

On-line koppeling van ANIMO en RT3D voor dynamische modellering van nutriëntentransport op regionale schaal

Opdrachtgever

Deltares

Kenmerk

0906-0137-cl

Pagina's

82

Projectnummer:

092.35166/01.06

Versie	Datum	Auteur	Paraaf	Review	Paraaf	Goedkeuring	Paraaf
	2009-12	Gijs Janssen				Hilde Passier	
		Bas van der Grift					
		Jasper Griffioen					
		Piet Groenendijk					

Status

definitief

Inhoud

1	Introductie	3
1.1	Wat is ANIMO-RT3D?	3
1.2	Waarom ANIMO-RT3D?	3
1.2.1	Aanleiding van de koppeling	3
1.2.2	Waarom mechanistisch modelleren?	4
1.2.3	Waarom regionaal modelleren?	5
1.2.4	Waarom 3D modelleren?	6
1.2.5	Waarom dynamisch modelleren?	6
1.2.6	Waarom on-line gekoppeld modelleren?	8
1.3	Positie in het Nederlandse en internationale modelinstrumentarium	8
2	Hydrologische invoer voor ANIMO-RT3D: Postprocessing MODMSW voor stoftransportmodellering	11
2.1	Inleiding	11
2.2	Methode voor postprocessing MODMSW	12
2.2.1	Prerun met MODMSW	12
2.2.2	Keuze en implementatie van het Grensvlak	13
2.2.3	Definitieve run met MODMSW	16
2.2.4	Desaggregatie van hydrologische uitvoer	16
3	Chemie	21
3.1	Oplossing van transport en reacties in ANIMO en RT3D	21
3.2	Stofkringlopen in het ANIMO-domein	21
3.3	Stofkringlopen in het RT3D-domein	21
3.3.1	Vereenvoudigende aannames t.o.v. de ANIMO-chemie	21
3.3.2	Reactievergelijkingen	22
4	Technische implementatie van de koppeling	31
4.1	Algemene aspecten	31
4.1.1	Modelversies	31
4.1.2	Timing	31
4.1.3	Wijze van communicatie	31
4.1.4	Uitwisseling van concentraties	31
4.1.5	Rekenvolgorde	32
4.1.6	Externe fluxen	33
4.2	Flowchart	33
4.2.1	Uitleg ANIMO	34
4.2.2	Uitleg RT3D	38
5	Invoer/Uitvoer	43
5.1	Directorystructuur ANIMO-RT3D	43
5.2	Invoer/uitvoer ANIMO	44
5.2.1	Invoer	44
5.2.2	Uitvoer	48
5.3	Invoer/uitvoer RT3D	51
5.3.1	Invoer	51
5.3.2	Uitvoer	53

6 Verificatie van de RT3D chemie	55
6.1 Het verificatiemodel	55
6.1.1 Discretisatie	55
6.1.2 Invoer	55
6.1.3 Timing	57
6.2 Resultaten	57
6.3 Beperkingen van de verificatie en aanbevelingen	58
7 Rekenvoorbeeld	63
7.1 Invoer van het testmodel	63
7.1.1 Algemene omschrijving van het MODMSW-model	63
7.1.2 Herdiscretisatie en bepaling van het grensvlak	64
7.1.3 Invoer RT3D en ANIMO	65
7.2 Resultaten	65
8 Evaluatie van de modelkoppeling	73
8.1 Wijze van koppelen	73
8.2 Aannames	74
8.3 Geheugengebruik	75
8.4 Rekensnelheid	76
LITERATUUR	79

1 Introductie

1.1 Wat is ANIMO-RT3D?

ANIMO-RT3D is het acroniem voor een gekoppeld transportmodel voor nutriënten tussen de onverzadigde en verzadigde zone. ANIMO (Agricultural Nutrient Model, Groenendijk et al., (2005), Renaud et al., (2005)) is een quasi-2D transportmodel dat in deze modelaanpak gebruikt wordt voor de onverzadigde zone. ANIMO is ontwikkeld door Alterra en beschrijft in detail het verloop van de koolstof-, stikstof- en fosforcyclus in de bodem, onder invloed van dynamische meteorologische (neerslag, temperatuur, verdamping) en agrarische (landbouwmanagement) omstandigheden.

RT3D (Reactive Multi-species Transport in 3D, (Clement (1997;2003)) is een generiek 3D reactief-transportmodel voor de verzadigde zone. In RT3D kunnen door de modelleur alle gewenste stofgedragingen zelf ingebracht worden via een door de gebruiker gedefinieerde reactiemodule. In ANIMO-RT3D zijn uit ANIMO die onderdelen uit de C, N en P-cyclus overgebracht naar RT3D-procesformuleringen die voor de permanent verzadigde zone nog relevant worden geacht.

De koppeling tussen ANIMO en RT3D is tot stand gebracht door beide modellen over een vooraf bepaald en vastgezet grensvlak met elkaar te laten communiceren. De hydrologie (waterfluxen) voor ANIMO-RT3D wordt aangeleverd door een MODFLOW-MetaSWAP-simulatie. De chemie en transportbeschrijvingen in het ANIMO-domein zijn identiek gebleven aan het stand-alone ANIMO.

1.2 Waarom ANIMO-RT3D?

1.2.1 Aanleiding van de koppeling

Op dit moment worden regionale en landsdekkende modelberekeningen van het transport en gedrag van nutriënten van bron (vooral landbouw) tot receptor (oppervlaktewater, grondwaterreserves, winningen etc.) gewoonlijk uitgevoerd met behulp van het landelijke emissiemodel STONE, wat bestaat uit het 1D/quasi-2D hydrologische model SWAP en het nutriëntentransportmodel ANIMO. Doordat SWAP Richard's Equation oplost, maakt het de berekening van stoftransport mogelijk onder variabel verzadigde omstandigheden. Dit is een belangrijke eigenschap, omdat onverzadigde zone-processen een belangrijke rol spelen in het nutriëntentransport en omdat uitspoeling van nutriënten richting drainage en oppervlaktewater sterk afhangt van de grondwaterstanden (zie ook sectie 1.2.5). In het modelconcept van de uitspoeling van nutriënten naar het oppervlaktewater wordt in ANIMO uitgegaan van een diffuse belasting van de bodem. Peters en Griffioen (2005; 2006) hebben laten zien dat het ANIMO-concept bevredigende resultaten geeft onder vereenvoudigde omstandigheden. Als de aanname van diffuse belasting niet meer geldt, zoals bij puntverontreinigingen of bij de infiltratie van oppervlaktewater in het grondwatersysteem, voldoet het ANIMO-concept niet.

Als binnen het gemodelleerde gebied de aanname van diffuse belasting niet gedaan kan worden, moet voor het 1D/quasi-2D-ANIMO-concept het gebied opgesplitst worden in deelgebieden waarvoor deze aanname wel geldt. Zodra echter horizontaal transport *tussen* deze deelgebieden belangrijk is voor de uitkomst van de studie is echter een model nodig waarin het transport tussen bron en receptor expliciet kan worden beschreven.

De 3D reactief transportcode RT3D, welke normaal gesproken de benodigde hydrologische invoer verkrijgt vanuit MODFLOW, is hiervoor geschikt. Het nadeel van MODFLOW is echter dat het niet geschikt is voor variabel verzadigde omstandigheden en onverzadigde grondwaterstroming. Hoewel RT3D in principe makkelijk aan te passen zou zijn voor het ontvangen van onverzadigde waterfluxen vanuit een hydrologisch model, kan een MODFLOW-simulatie dus alleen verzadigde fluxen leveren aan RT3D. Daarbij komt dat grote aanvullingen en aanpassingen nodig zijn in de RT3D-code om de invloed van variërende verzadiging en aëratie op het reactief transport te kunnen simuleren.

De in dit rapport beschreven modelkoppeling, waarin ANIMO en RT3D on-line zijn gekoppeld, laat zien dat het mogelijk is een model te construeren dat enkele bovengenoemde bezwaren ondervangt. Een uitgangspunt voor de koppeling is dat het resulterende model gebruik maakt van de hydrologische invoer vanuit de eerder gerealiseerde on-line koppeling tussen MODFLOW en (Meta)SWAP. Het resultaat is een modelcombinatie waarin de rol van de individuele modellen wordt beperkt tot waar ze het beste in zijn: MetaSWAP en ANIMO verzorgen de onverzadigde zone en het bovenste grondwater, en zodra driedimensionale grondwaterstroming en transport belangrijk worden, of de aanname van diffuse belasting van de bodem niet meer geldt, nemen MODFLOW en RT3D het over.

De gerealiseerde koppeling is een prototype, bedoeld om het koppelingsprincipe te testen en om aan te tonen dat een dergelijke koppeling mogelijk is. Bij de uitwerking zijn enkele keuzes gemaakt, waarvoor misschien alternatieve opties voorhanden zijn. Het hoofddoel was echter het tot stand brengen van een koppeling en niet een onderzoek waarin verschillende koppelingsvarianten met elkaar worden vergeleken. Dit rapport toont aan dat het hoofddoel ook daadwerkelijk is gerealiseerd. De gekozen benadering heeft enkele beperkingen tot gevolg die bij de uitwerking voor real-case studies nog zullen moeten worden ondervangen.

De koppeling tussen ANIMO en RT3D levert een modelinstrumentarium op waarmee het transport en gedrag van nutriënten, over de gehele transportroute (van bron tot receptor),

- mechanistisch;
- op regionale schaal
- volledig 3-dimensionaal;
- instationair;
- en on-line gekoppeld

gemodelleerd kan worden.

Het belang van bovengenoemde vijf punten wordt hieronder per bullet uitgelegd.

1.2.2 Waarom mechanistisch modelleren?

De processen van de C-, N- en P-cyclus in de bodem zijn complex en grijpen op diverse plaatsen op elkaar in. Omzettingsprocessen zijn afhankelijk van omgevingsfactoren en beschikbaarheid van reactanten, verlopen traag of juist zeer snel en zelfs instantaan. Daarnaast bestaan er complexe interacties met het landbouwmanagement en de vegetatie.

De mechanistische beschrijvingen van al deze processen en interacties in ANIMO weerspiegelen de actuele kennis op het gebied van het gedrag van nutriënten in de bodem. Een dergelijke gedetailleerde, procesgeoriënteerde aanpak heeft de volgende voordelen t.o.v. eenvoudiger (bv. empirische of black-box) modellen:

- De mechanistische beschrijving van alle relevante processen maakt het doorrekenen van maatregelen eenvoudiger; het is gemakkelijker de maatregelen eenduidig te vertalen naar modelinvoer;

- Een mechanistische, state-of-the-art beschrijving van het gedrag van de verontreinigingen kan de acceptatie van modelresultaten bij door de modelstudie beïnvloede partijen vergroten. Gezien de politiekgevoeligheid van het nutriëntendossier verdient het maximaliseren van deze acceptatie alle aandacht.

Deze voordelen hebben geleid tot de keuze voor ANIMO voor het beschrijven van het gedrag van de nutriënten in bodem en grondwater. In ANIMO-RT3D wordt het nutriëntengedrag in de niet-permanent verzadigde zone gemodelleerd door ANIMO 4.0, waarbij geen wijzigingen zijn aangebracht in de procesbeschrijvingen zoals die in ANIMO 4.0 zijn ingebouwd. De interactie met het landbouwmanagement en met de vegetatie worden in ANIMO-RT3D dus ook op exact dezelfde manier beschreven als in ANIMO 4.0. In deze uitwerking van de modelkoppeling is ervoor gekozen om de permanent verzadigde zone vanaf een bepaalde diepte de reactief-transportbeschrijvingen van ANIMO zo goed mogelijk te vertalen naar het RT3D-concept. Hoofdstuk 3 gaat hier in detail op in. In Hoofdstuk 6 wordt de RT3D-chemie geverifieerd door 1D sommen uitgevoerd met ANIMO-RT3D rechtstreeks te vergelijken met 1D sommen uitgevoerd door enkel ANIMO.

1.2.3 Waarom regionaal modelleren?

Veel beleidsvragen spelen op regionale schaal. Dit kan zijn doordat het beleidsdoel zelf regionaal is gedefinieerd (bijvoorbeeld een doelstelling voor de waterkwaliteit van een grondwaterlichaam, of de waterkwaliteit van het oppervlaktewater in een bepaald gebied), of doordat het beleidsdoel regionale implicaties heeft. Zo is bijvoorbeeld de waterkwaliteit van een "regionale" waterloop afhankelijk van de kwaliteit van het toeleverende grond- en oppervlaktewater in het gebied dat door de waterloop afwatert, of kan het de kwaliteit van benedenstrooms gelegen gebieden beïnvloeden.

Regionale (en landelijke) vraagstukken vragen een andere modelleerpraktijk dan lokale vraagstukken. Het hogere schaalniveau heeft consequenties voor de relevantie van processen voor de modeluitkomsten: in een regionaal model doet bijvoorbeeld een individuele kleilens met een laterale doorsnede van 50 meter er zoveel niet toe, terwijl deze kleilens in een lokaal model van cruciaal belang kan zijn. Anderzijds heeft het voor een lokaal model bijvoorbeeld meestal geen zin, of is het praktisch gezien niet mogelijk, om de meteorologische invoer (neerslag/verdamping) ruimtelijk te distribueren, terwijl dit voor regionale modellen wel belangrijk en mogelijk is.

Daar waar ANIMO een zeer goede keuze is voor de mechanistische beschrijvingen van het nutriëntengedrag, heeft het model, vanwege het 1D/quasi-2D concept voor de hydrologie dat eraan ten grondslag ligt, beperkingen voor het modelleren van transport in een grondwatersysteem waar horizontaal transport tussen deelgebieden van belang is in combinatie met een gedistribueerde- of puntbelasting. 3D-transportmodellen zijn hiervoor beter geschikt (dit wordt in de volgende sectie verder toegelicht). Daarom is ervoor gekozen het werkterrein van ANIMO te beperken tot dat deel het van systeem waarin verwacht kan worden dat lateraal transport tussen deelgebieden van geringe betekenis is (dit komt neer op de onverzadigde zone plus het bovenste deel van het verzadigde grondwater) en de modellering van het transport in het diepere grondwater door RT3D te laten overnemen.

Bij de ontwikkeling van ANIMO-RT3D is ervan uitgegaan dat een MetaSWAP/MODFLOW-model de hydrologische invoer aanleveren, en de fysisch/chemische parameterisatie van de ondergrond wordt aangeleverd vanuit regionale/geregionaliseerde ondergrondschematisaties. Daarbij moet gedacht worden aan modellen en schematisaties met gridcellen met horizontale dimensies van 25x25 tot 250x250 meter (overeenkomstig de op dit moment ontwikkelde regionale grondwaterstromingsmodellen). Dit maakt dat ANIMO-RT3D is toegesneden op de regionale schaal, waarbij de kanttkening geplaatst dient te worden dat de in dit rapport

beschreven versie (ANIMO-RT3D 1.0) nog te CPU- en geheugenintensief is om daadwerkelijk met het grote aantal gridcellen (waardoor de regionale modellen doorgaans gekenmerkt worden) te kunnen rekenen. Op de technische optimalisatie van de code die nodig is om dit mogelijk te maken wordt in Hoofdstuk 8 verder ingegaan.

Hydrologische aannames, besproken in Hoofdstuk 2, maken de hier uitgewerkte koppeling van ANIMO-RT3D minder geschikt voor de lokale schaal met kleinere modelcellen.

1.2.4 Waarom 3D modelleren?

ANIMO is een 1D transportmodel, dat gebruik maakt van 1-dimensionale of quasi-2D hydrologische invoer (waterstroming). Een 1-dimensionale hydrologie houdt in dat er alleen verticale en geen laterale stroming mogelijk is. Concreet betekent dit dat stoffen het verticale modelcompartiment (de modelkolom) niet kunnen verlaten. In een quasi-2D gebruik van ANIMO wordt het oppervlakte- en drainagesysteem onderverdeeld in 5 drainageniveaus. Binnen 1 niveau worden de afstanden tussen de waterlopen/drains constant verondersteld en worden de fluxen van en naar het drainageniveau analytisch afgeleid. Zodra een stof via de laterale fluxterm de modelkolom verlaat, wordt het normaal gesproken direct toegekend aan het uitstroompunt van het substroomgebied waartoe de modelkolom behoort. De laterale transportroute tussen de modelkolom en de waterloop/drain wordt niet expliciet gemodelleerd. Het concept is geschikt voor de simulatie van transport naar waterlopen van diffuus belaste bodems.

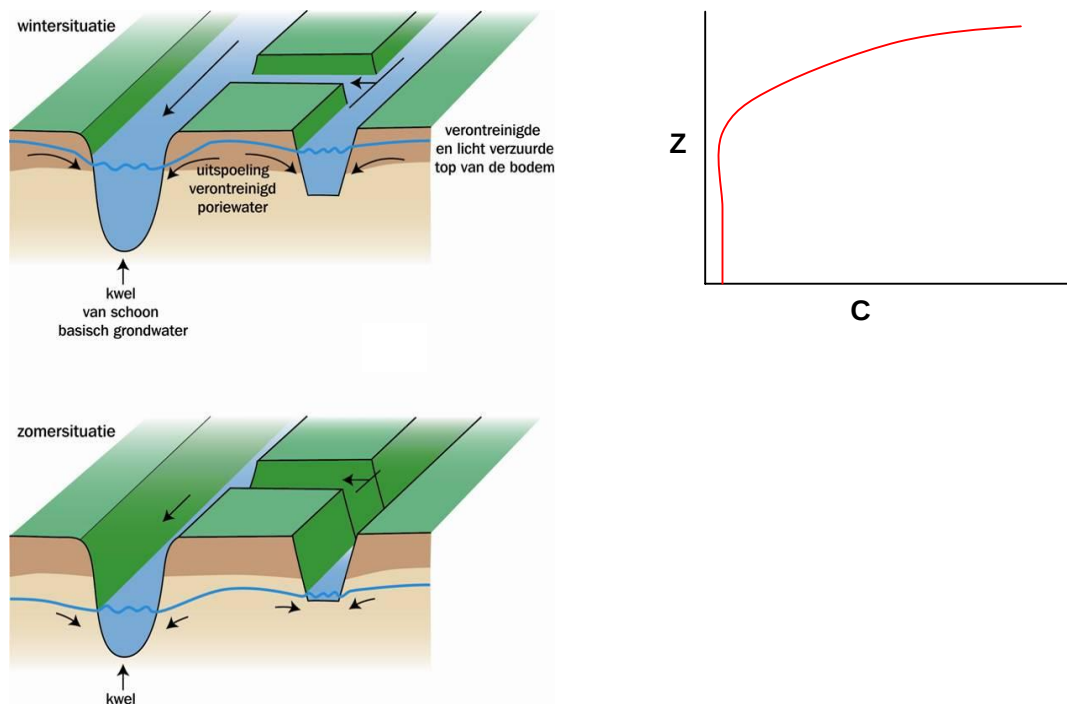
Dit quasi-2D concept kent belangrijke beperkingen:

- de rol van transport in het regionale grondwatersysteem kan niet goed meegenomen worden. Het quasi-2D concept houdt alleen rekening met transport naar het oppervlaktewater binnen een rekencel en houdt geen rekening met de uitwisseling tussen rekencellen. Met de diepte wordt deze uitwisseling steeds belangrijker voor een betrouwbare simulatie van het stoftransport.
- Doordat de driedimensionale stroombaan van “bronkolom” tot receptor niet expliciet wordt gemodelleerd worden de bodemeigenschappen en heterogeniteiten die een verontreiniging ondervindt langs deze stroombaan slechts geaggregeerd meegenomen. In een volledig 3D transportmodel kan deze 3D transportroute expliciet worden gemodelleerd en kunnen de ondervonden heterogeniteiten ook expliciet worden verdisconteerd.

Bovenin het profiel is de stroming voornamelijk verticaal gericht, waarbij van de kleine horizontale componenten aangenomen kan worden dat deze op korte afstand ontwateren. In dat geval kan de quasi-2D benadering wel een werkbare aanpak zijn. Hiervan wordt in ANIMO-RT3D gebruik gemaakt door ANIMO, wat alleen gebruikt wordt voor het niet-permanent verzadigde deel van het modeldomein en dus alleen op het bovenste deel van het profiel, te laten draaien op quasi-2D SWAP hydrologie. Omdat de MODFLOW-RT3D combinatie niet kan omgaan met variabele verzadigdheid, biedt de quasi-2D benadering van SWAP, een hydrologisch model dat Richards' vergelijking oplost, goede uitkomst. Hoofdstuk 2 gaat verder in op de hydrologische invoer van ANIMO-RT3D.

1.2.5 Waarom dynamisch modelleren?

Vaak worden voor regionale stoftransportvraagstukken stationaire modellen gebruikt. Dit houdt in dat de hydrologische randvoorwaarden gedurende de gehele gesimuleerde periode constant gehouden worden op hun over de gesimuleerde periode gemiddeld geachte waarden.



Figuur 1.1. a) Illustratie van hoe de uitspoelingsconcentratie van het grondwater afhangt van de grondwaterstand. In het voorbeeld wordt een wintersituatie (boven) met hoge grondwaterstanden tot in het sterk verontreinigd deel van het bodemprofiel, vergeleken met een zomersituatie (onder) met lage grondwaterstanden in het schonere deel van de bodem. b) Een typisch verontreinigingsprofiel. Z = diepte in het profiel (maaiveld boven), C = gehalte aan verontreiniging in de bodem.

Het is echter bekend dat de kwaliteit van het in het oppervlaktewater uittredende grondwater afhangt van de grondwaterstand. Dit heeft onder andere de volgende oorzaken:

- het bovenste deel van het bodemprofiel is over het algemeen sterker antropogeen beïnvloed en dus sterker verontreinigd dan het profiel daaronder. Bij hogere grondwaterstanden staat het grondwater daarom in contact met een sterker verontreinigd deel van de bodem, en is de kwaliteit van het gedraineerde grondwater dus ook slechter. Dit wordt geïllustreerd in Figuur 1.1a.
- Met de grondwaterstand verandert ook de relatieve bijdrage van de kwel aan de totale uitstroom in het oppervlaktewater. Deze kwel is van een andere (vaak betere, al is dat niet altijd het geval) kwaliteit dan het via het ondiepe grondwater uitstromende water.
- Bij hogere grondwaterstanden zijn de transportroutes van maaiveld naar oppervlaktewater korter. Er is dan minder tijd en reactiecapaciteit beschikbaar voor omzetting en vastlegging van de verontreinigingen.
- Veel omzettingsprocessen in de bodem zijn afhankelijk van de aeratie (denitrificatie) en de mate van beluchting van bodemlagen werkt niet-lineair door in de processen. Met een stationaire hydrologie zouden deze processen sterk worden overschat of worden onderschat.

Het feit dat de uitspoelingsconcentraties afhangen van de grondwaterstanden resulteert op drie manieren in beperkingen van stationaire modellen:

- In een stationaire modelaanpak is de grondwaterstand een over een langere tijd berekend gemiddelde waarin de pieken in deze grondwaterstand wel zijn verwerkt, maar ook worden gecompenseerd door lagere grondwaterstanden. Door het niet-

lineaire karakter van bovengenoemde effecten (bijvoorbeeld: het verontreinigingsprofiel van de bodem vertoont typisch een convexe vorm, zie Fig. 1.1b) levert een middeling van grondwaterstanden geen correcte middeling op van de uitspoelingsconcentraties (resultaat = onder- of overschatting).

- Piekbelasting van het oppervlaktewater kan met een stationaire modelaanpak niet zichtbaar gemaakt worden. Dat maakt stationair modelinstrumentarium ongeschikt voor risicobeoordelingen met inachtneming van het optreden van dergelijke piekbelastingen. Uit diverse onderzoeken is gebleken dat met name de piekbelastingen een drempel kunnen vormen voor het behalen van bepaalde ecologische doelen in het oppervlaktewatersysteem.
- Bij toetsing en ijking van stationaire modellen aan veldgegevens zouden de gegevens eerst omgewerkt moeten worden naar de "stationaire tijdschaal", voordat een vergelijking mogelijk is. Concentraties op een bepaald punt en op een bepaald tijdstip berekend met een dynamisch model laten zich beter vergelijken met een meting op hetzelfde punt en voor hetzelfde tijdstip.

ANIMO-RT3D werkt met tijdsafhankelijke hydrologische invoer. De meest gebruikte tijdsstaplengte in ANIMO is 1 dag, alhoewel het ook met stappen van een decade kan werken. RT3D werkt met hydrologische invoer gegenereerd door MODFLOW modellen, waarbij de tijdsstappen zijn afgestemd op die van ANIMO en dus normaal gesproken ook een lengte van 1 dag hebben.

1.2.6 Waarom on-line gekoppeld modelleren?

ANIMO-RT3D is een on-line modelkoppeling van nutriëntentransport in de onverzadigde zone en nutriëntentransport in de verzadigde zone, waarbij de koppeling plaatsvindt via een vooraf vastgesteld grensvlak. "On-line koppelen" houdt in dat de twee submodellen op tijdsstapbasis over dit grensvlak met elkaar communiceren en informatie uitwisselen. Dit is dus in tegenstelling tot "off-line koppelen", waarbij de twee modellen onafhankelijk van elkaar en sequentieel worden gerund, waarbij het ene submodel invoer genereert voor het andere zonder dat er terugkoppeling plaatsvindt. Er is bij een on-line koppeling dus sprake van tweerichtingsverkeer, terwijl er bij een off-line koppeling sprake is van éénrichtingsverkeer.

In geval van een off-line koppeling wordt het model dat als eerste wordt gerund (logischerwijs het onverzadigde-zonemodel) niet op de hoogte gesteld van veranderingen van in het ontvangende model (het verzadigde-zonemodel). In andere woorden: de onderrandvoorwaarde van het onverzadigde-zonemodel wordt niet geactualiseerd naar aanleiding van processen die in het verzadigde-zonemodel plaatsvinden. Dit levert fouten op zodra deze onderrandvoorwaarde een rol gaat spelen. Dit is het geval indien kwel plaatsvindt over het grensvlak tussen de twee modellen in plaats van infiltratie, en het onverzadigde-zonemodel dus het "ontvangende" model wordt.

In ANIMO-RT3D worden de onderrandvoorwaarde van het onverzadigde-zonemodel (ANIMO) en de bovenrandvoorwaarde van het verzadigde-zonemodel (RT3D) op tijdsstapbasis geactualiseerd. Hoe dit gebeurt wordt in detail beschreven in Hoofdstuk 4.

1.3 Positie in het Nederlandse en internationale modelinstrumentarium

Door gedetailleerde beschrijvingen van de landbouwpraktijk en de dynamische fysisch/chemische processen in het plant-bodem-atmosfeer-systeem (ANIMO) on-line te koppelen aan een volledig 3-dimensionale beschrijving van het transport in het grondwatersysteem (RT3D) is een uniek en state-of-the-art modelinstrument gerealiseerd

voor de evaluatie van waterkwaliteitsgerichte maatregelen op de regionale schaal. Daarbij is voor Nederland vooral het feit dat nu transport in het continuüm onverzadigde zone – bovenste grondwater – regionale grondwaterstroming dynamisch doorgerekend kan worden een belangrijke nieuwe mogelijkheid. De effecten van laterale uitwisseling tussen deelgebieden en van gedistribueerde inputs in de bodem op de waterkwaliteit kunnen nu in studies worden meegenomen. Internationaal is nieuw dat de gedetailleerde procesbeschrijvingen van de stofkringlopen in een continuüm zijn gekoppeld aan stoftransport in het regionale grondwater. De koppeling tussen DAISY en MIKE-SHE was tot op heden het meest vooraanstaande modelinstrument voor gecombineerde modellering van nutriëntentransport in de onverzadigde en verzadigde zone en heeft als beperking dat de onverzadigde zone en het regionale grondwater als afzonderlijke deelsystemen worden doorgerekend.

De reden voor de keuze om bij de ontwikkeling van een gekoppeld verzadigde zone-onverzadigde zone transportmodel aan te sluiten bij de hydrologische modellen van het Nationaal Hydrologisch Instrumentarium (NHI), is tweeledig:

- Het prototype van de ANIMO-RT3D-koppeling is een belangrijke voorzet geven voor de aanpak van regionale waterkwaliteitsmodellering in NHI-Kwaliteit.
- De hydrologische invoer wordt op deze manier gegenereerd met vertrouwde modellen (MODFLOW en MetaSWAP), welke voor een groot deel reeds landsdekkend zijn geparametriseerd.

2 Hydrologische invoer voor ANIMO-RT3D: Postprocessing MODMSW voor stoftransportmodellering

2.1 Inleiding

In Hoofdstuk 1 is het belang aangegeven van een on-line koppeling tussen waterstromings- en stoftransportprocessen in de onverzadigde zone en de verzadigde zone. Tevens is reeds gemeld dat voor de koppeling van het transport tussen de twee zones gekozen is voor een communicatie over een vast grensvlak. Boven dit grensvlak draait het quasi-2-dimensionale ANIMO, onder het grensvlak het 3-dimensionale RT3D. Deze keuze voor een “grensvlakimplementatie” voor de transportkoppeling staat in principe los van de keuze voor de *hydrologische* koppeling tussen de twee modeldomeinen. Er zou bijvoorbeeld voor gekozen kunnen worden om deze koppeling tot stand te brengen door de verzadigde en onverzadigde zone als één entiteit te beschouwen, zoals bijvoorbeeld gebeurt in HydroGeoSphere (Therrien et al., 2007) en MIKE SHE. Voorwaarde is dan wel dat dit op een volledig 3-dimensionale wijze gebeurt, omdat RT3D 3D hydrologische invoer vereist. 3D hydrologie is wel om te bewerken naar 2D concepten (zoals in dit Hoofdstuk zal worden aangetoond), maar 1- of 2D hydrologie is alleen om te werken naar 3D concepten als extra aannames worden gedaan. SWAP, een model dat de verzadigde en onverzadigde zone als één entiteit te beschouwt, kan niet gebruikt worden voor het genereren van hydrologische invoer voor het RT3D-domein zonder dat extra aannames worden gedaan over de horizontale uitwisseling tussen modelkolommen.

Voor het genereren van hydrologische invoer voor ANIMO-RT3D is echter gekozen aan te sluiten bij de ontwikkelingen binnen het raamwerk van het Nationaal Hydrologisch Instrumentarium (NHI), voor de in Hoofdstuk 1 genoemde redenen. De consensus die in het NHI-traject is nagestreefd heeft geleid tot een koppeling van bestaande *special purpose* modellen, t.w. MetaSWAP voor de onverzadigde zone en MODFLOW voor de verzadigde zone. De koppelingen tussen de verschillende domeinen zijn tot stand gebracht door, simpel gesteld, de verschillende modellen op tijdstapbasis met elkaar te laten communiceren en elkaar dus per tijdsstap op de hoogte te stellen van elkaars toestanden, voor zover deze toestanden nodig zijn voor het ontvangende model om een volgende tijdsstap uit te voeren. Zonder in al teveel technische details te treden, werkt de koppeling tussen de onverzadigde en de verzadigde zone in MODFLOW-MetaSWAP (hierna MODMSW genoemd) als volgt: in het iteratieschema berekent MetaSWAP, op basis van o.a. de grondwaterstand, de grondwateraanvulling naar het MODFLOW domein, en past de bergingscoëfficiënt (bergingsverandering per eenheid stijghoogteverandering) van MODFLOW aan, aan de hand van het door MetaSWAP berekende vochtprofiel. Op basis van deze informatie berekent MODFLOW een nieuwe grondwaterstand. De iteratieprocedure wordt beëindigd als de driegenomde grootheden in MetaSwap en MODFLOW dezelfde waarde hebben bereikt, waardoor een correcte waterbalans wordt gewaarborgd voor het geïntegreerde systeem van onverzadigde zone en grondwater.

De resultaten van MODMSW kunnen echter niet direct gebruikt worden voor stoftransportmodellering: de verticale discretisatie van het bodemsysteem die in MODMSW wordt gehanteerd is hier te grof voor. MetaSWAP modelleert de onverzadigde zone namelijk als twee “Boxen”: één voor de wortelzone en één voor de ondergrond. De aanwezigheid van snelle omzettingsprocessen en sterke adsorptiemechanismen, en (mede daardoor) sterke gradiënten in gehalten en concentraties in de bovengrond, maken dat de wortelzone en de bovenste meters van ondergrond onderverdeeld moeten worden in lagen van enkele

centimeters tot hooguit enkele decimeters dik om de invloed van numerieke dispersie op de modelresultaten te beperken. De discretisatie van het modeldomein in ANIMO-RT3D is dus veel fijner dan het discretisatieniveau waarop MODMSW hydrologische informatie genereert. Gelukkig is het mogelijk om, na het uitvoeren van een MODMSW simulatie, de hydrologische uitvoer van deze simulatie te *desaggregeren* naar in principe elk gewenst discretisatieniveau. Deze mogelijkheid tot desaggregatie vormt de basis van de methode voor postprocessing van de hydrologische uitvoer van MODMSW voor transportmodellering. In de rest van dit hoofdstuk wordt aan de hand van een kleinschalig testmodel uitgelegd hoe MODMSW gebruikt en nabewerkt wordt om hydrologische invoer te genereren die geschikt is voor de on-line gekoppelde, dynamische stoftransportmodellering zoals geïmplementeerd in ANIMO-RT3D.

2.2 Methode voor postprocessing MODMSW

Deze sectie verdeelt de stappen die nodig zijn voor de het genereren van hydrologische invoer voor ANIMO-RT3D in 4 delen:

1. Prerun met MODMSW;
2. Keuze en Implementatie van het Grensvlak;
3. Definitieve run met MODMSW;
4. Desaggregatie van hydrologische uitvoer.

Per deel worden de stappen in dat deel gepresenteerd en besproken, waarbij de nummering van de te nemen stappen over de gehele sectie doorloopt. In totaal worden 7 stappen besproken.

2.2.1 Prerun met MODMSW

Stap 1) Er wordt een MODMSW simulatie uitgevoerd op een nieuw of bestaand grondwaterstromingsmodel. Uit de resultaten van de MODFLOW-MetaSWAP simulatie wordt per modelkolom de LGS (*laagst gesimuleerde grondwaterstand*) bepaald.

Omdat twee modeldomeinen gekoppeld worden waarbij elk domein gesimuleerd wordt door zijn eigen *special purpose* model, kan niet ontkomen worden aan het aanwijzen van een grensvlak. Het grensvlak is het vlak waarover fluxen en concentraties tussen beide modellen worden uitgewisseld.

Een dynamisch grensvlak, meebewegend met het freatische niveau zoals in MODMSW, zou conceptueel de meest optimale optie zijn, maar voor transportprocessen wordt dit nog als een brug te ver gezien vanwege technische moeilijkheden. Er dient daarom gezocht te worden naar een geschikte positionering van een vast (stationair) grensvlak.

Omdat, zoals later uitgelegd zal worden, SWAP (en ANIMO) in ANIMO-RT3D 1.0 als strikt 1-dimensionale modellen gebruikt worden, en er daardoor effectief de aanname gemaakt wordt dat stroming in het door SWAP/ANIMO gemodelleerde domein geen horizontale componenten heeft, is het van belang de verzadigde dikte in dit domein gedurende de simulatie zo klein mogelijk te houden. Aan de andere kant dient het door MODFLOW gesimuleerde domein per definitie verzadigd te blijven, omdat MODFLOW en RT3D niet overweg kunnen met onverzadigde situaties. Aan beide criteria wordt voldaan door het grensvlak tussen beide domeinen zo dicht mogelijk onder de *laagste grondwaterstand van de simulatie* (LGS) te leggen.

Om deze LGS te bepalen is de eerste stap in de hydrologische koppeling tussen de verzadigde en onverzadigde zone voor stoftransportmodellering het uitvoeren van een voorbereidende MODMSW simulatie. Figuur 2.1(1) laat ter illustratie een schematische weergave van een MODMSW-model zien. In deze figuur stelt de groene zone de wortelzone

voor en de bruine zone de MetaSWAP "Subsoil". Voor beide zones is een MetaSWAP "Box" geïmplementeerd. Met de geleidelijk in de kleur van de MODFLOW-lagen (wit) overlopende bruine "Subsoil Box" is aangegeven dat MODFLOW laag 1 met deze "Subsoil Box" van MetaSWAP communiceert.

Deze 1^e simulatie dient uitsluitend voor het bepalen van de LGS. In Figuur 2.1(2) is deze LGS geïllustreerd.

2.2.2 Keuze en implementatie van het Grensvlak

Stap 2) Er wordt een SWAP-discretisatie gekozen waarop de resultaten van de MODFLOW-MetaSWAP simulatie gedesaggregeerd zullen worden.

Stap 3) Aan de hand van de gekozen SWAP-discretisatie wordt het grensvlak bepaald;

Stap 4) Met behulp van een herdiscretisatietool wordt het MODFLOW-model verticaal opgeknipt waarbij een grensvlaksysteem wordt gecreëerd.

Ad 2. De hydrologische informatie die wordt gegenereerd met een MODMSW simulatie moet, zoals gezegd, gedesaggregeerd worden naar een fijner discretisatieniveau om transportberekeningen mogelijk te maken. Deze fijnere discretisatie wordt in het volgende de "SWAP-discretisatie" genoemd. Dit omdat in feite (deels) teruggekeerd wordt naar het basismodel SWAP en de preruns die met SWAP zijn uitgevoerd om de tabulaire invoer van MetaSWAP te genereren. In Stap 2 wordt deze fijnere discretisatie gekozen (zie ter illustratie Figuur 2.1(3)).

Ad 3. De exacte uiteindelijke positie van het grensvlak wordt bepaald door de hierboven gekozen SWAP-discretisatie. Het grensvlak wordt namelijk gelegd op de onderkant van de SWAP-laag in de SWAP-discretisatie welke de LGS bevat. Zie Figuur 2.1(4).

Ad 4. Voor ANIMO-RT3D 1.0 is ervoor gekozen om waterfluxen en stofconcentraties uit te wisselen. Een koppeling waarbij informatie over vrachten en stoffluxen zou worden uitgewisseld is alleen te realiseren door een aanpassing van de modellen. De fluxen en de concentraties worden tussen de twee modellen uitgewisseld over het bovengenoemde grensvlak. De implementatie van deze uitwisseling wordt sterk vergemakkelijkt door boven en onder het grensvlak in beide domeinen een corresponderende modellaag te creëren. Met andere woorden: de modellaag direct boven het grensvlak bestaat zowel in het MODFLOW domein als in het SWAP domein. Hetzelfde geldt voor de modellaag direct onder het grensvlak. Op deze manier wordt een *grensvlaksysteem* gecreëerd.

Het voordeel van het grensvlaksysteem is het volgende: door de concentraties onder en boven het grensvlak in beide modeldomeinen voor dezelfde laagdikte te berekenen kan volstaan worden met de concentraties berekend door het ene model eenvoudigweg door te geven aan dezelfde laag in het andere model. Met behulp van de voor beide modellen bekende waterflux over het grensvlak wordt dan de stofflux over het grensvlak automatisch correct berekend: de randvoorwaarden zijn altijd kloppend geactualiseerd.

Het grensvlaksysteem bestaat uit de SWAP-lagen aan weerszijden van het Grensvlak (zie Figuur 2.1(5)).

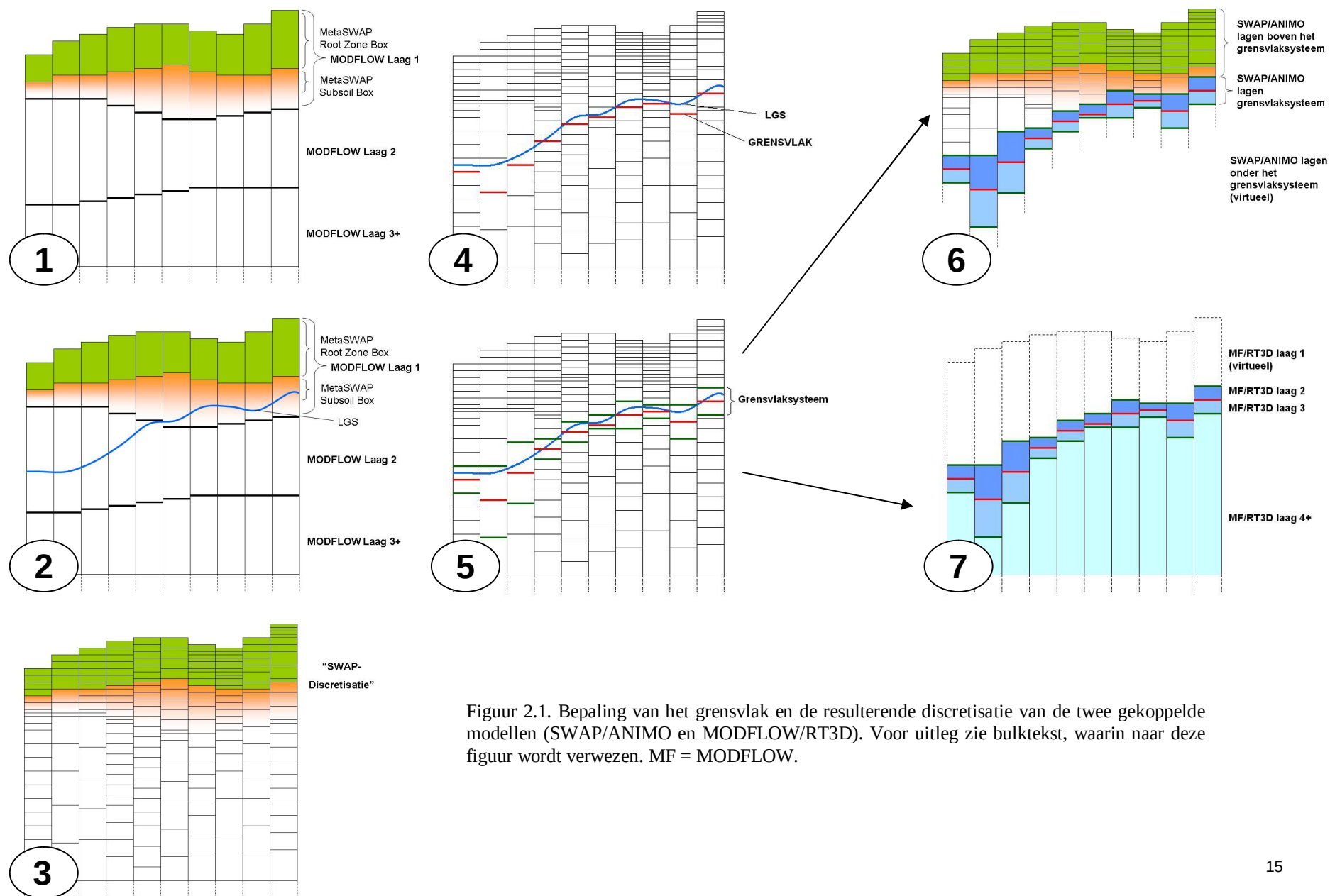
Om het grensvlaksysteem in te bouwen wordt het MODFLOW-model waarmee de prerun van de MODMSW simulatie is uitgevoerd (Stap 1) geherdiscretiseerd in de verticaal. Hierbij worden de volgende regels aangehouden:

- De onderkant van MODFLOW laag 1 is *per definitie* gelijk aan de bovenkant van de SWAP laag (in de bij Stap 2 gekozen SWAP-discretisatie) boven het grensvlak;

- De onderkant van MODFLOW laag 2 is *per definitie* het grensvlak (en dus de onderkant van de SWAP laag waarin de LGS zich bevindt);
- De onderkant van MODFLOW laag 3 is *per definitie* gelijk aan de onderkant van de SWAP laag onder het grensvlak;
- De onderkanten van MODFLOW lagen 4 en verder zijn gelijk aan de voor RT3D gewenste discretisatie.

Het resultaat van Stap 4 is voor het SWAP/ANIMO-domein geïllustreerd in Figuur 2.1(6) en voor het MODFLOW/RT3D-domein in Figuur 2.1(7). Door implementatie van het grensvlak zijn beide domeinen overlappend gemaakt, waarbij de overlap bestaat uit allebei de modellagen van het grensvlaksysteem. De bovenste MODFLOW laag is een virtuele laag: deze laag wordt virtueel genoemd omdat MODFLOW (en later RT3D) wel draait op dit domein, maar we hier niet geïnteresseerd zijn in de resultaten daarvan. Immers, SWAP en ANIMO geven voor dit domein geschiktere resultaten. We zijn alleen geïnteresseerd in de MODFLOW en RT3D resultaten voor het domein in en onder het grensvlaksysteem.

Het SWAP-domein (Figuur 2.1(6)) heeft de SWAP-discretisatie en loopt minimaal door tot en met het grensvlaksysteem. Indien het SWAP domein dieper doorloopt zijn de SWAP lagen onder het grensvlaksysteem virtueel. In deze lagen draaien SWAP en ANIMO dan wel, maar we zijn niet geïnteresseerd in hun resultaten. We zijn alleen geïnteresseerd in de SWAP- en ANIMO-resultaten voor het domein in en boven het grensvlak.



Figuur 2.1. Bepaling van het grensvlak en de resulterende discretisatie van de twee gekoppelde modellen (SWAP/ANIMO en MODFLOW/RT3D). Voor uitleg zie bulktekst, waarin naar deze figuur wordt verwezen. MF = MODFLOW.

2.2.3 Definitieve run met MODMSW

Stap 5) Er wordt een nieuwe MODFLOW-MetaSWAP simulatie uitgevoerd op het in stap 4 geherdiscretiseerde model. Hierbij worden de transmissiviteiten van MODFLOW lagen 1 en 2 op 0 gezet.

Ad 5. Stap 5 levert voor de MODFLOW/RT3D discretisatie een hydrologische uitvoerfile met daarin alle benodigde fluxen tussen de modelcellen en fluxen van en naar *sources* en *sinks*. Hiermee is het volledige stromingspatroon, benodigd voor de transportmodellering in het RT3D domein, gedefinieerd. De hydrologische uitvoerfile is een ongeformatteerd bestand met default de extensie .fmi (Flow Model Interface).

De postprocessing van de MODMSW-resultaten naar het fijnere discretisatieniveau houdt, zoals later wordt uitgelegd, onder andere in dat de MODFLOW-fluxen boven het grensvlak naar het SWAP-domein worden overgebracht. In de hier uitgewerkte koppeling van ANIMO – RT3D is het gewenst dat in het deel boven het grensvlak geen laterale transporttermen voorkomen, omdat in ANIMO geen communicatie mogelijk is tussen modelkolommen¹. Om te forceren dat er geen laterale fluxen boven het grensvlak gesimuleerd worden, wordt in het MODFLOW model de transmissiviteit van de eerste twee modellagen (dus de lagen boven het grensvlak) op nul gezet. Hiermee wordt horizontale stroming voorkomen. Hier wordt dus een belangrijke aanname gedaan, welke in haar algemeenheid als volgt geformuleerd kan worden:

Horizontale afstroming naar aangrenzende cellen is in de waterkolom tussen de actuele grondwaterstand en de laagste optredende grondwaterstand te verwaarlozen.

De werkbaarheid van deze aanname wordt besproken in Hoofdstuk 8.

2.2.4 Desaggregatie van hydrologische uitvoer

Stap 6) De MODMSW-uitvoer, verkregen in Stap 5, wordt gedesaggregeerd naar de in Stap 3 gekozen SWAP-discretisatie.

Stap 7) De MODFLOW-fluxen van en naar *sinks* en *sources* in de MODMSW-uitvoer voor het domein boven het grensvlak worden overgebracht naar het verzadigde deel van de in Stap 3 gekozen SWAP-discretisatie. Deze “overrulen” dus het resultaat van Stap 6 voor het verzadigde deel.

Ad 6. Om ook voor het SWAP/ANIMO domein en de SWAP-discretisatie hydrologische informatie te verkrijgen, worden de resultaten van de MODMSW simulatie gedesaggregeerd naar deze fijnere resolutie. Dit gebeurt door de hydrologische toestanden van de twee MetaSWAP-“Boxen” en MODFLOW, op basis van de hydrologische bodemparameters van de ondergrond, om te werken naar fijnere vochtprofielen en waterbalansen. Hiervoor wordt de aan het metamodel MetaSWAP ten grondslag liggende basisinformatie gebruikt. De desaggregatie wordt uitgevoerd met de desaggregatietool POSTMSW.

Stap 6 levert voor elke SWAP/ANIMO kolom de benodigde hydrologische informatie (watergehaltes, grondwaterstanden, fluxen) voor de transportberekeningen. De gedesaggregeerde hydrologische uitvoer voor de SWAP/ANIMO kolommen bestaat uit een serie ongeformatteerde bestanden met (normaal gesproken) de extensie .unf.

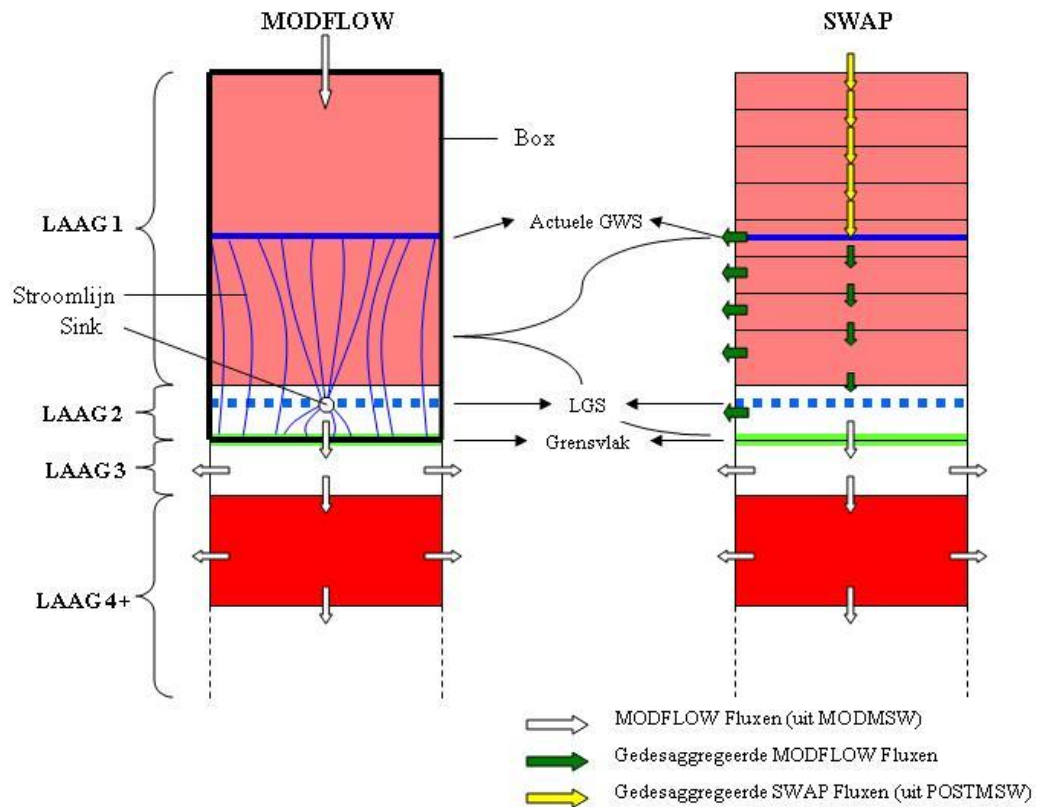
¹ Deze regel geldt voor de communicatie tussen modelkolommen. Zoals in hoofdstuk 7 duidelijk zal worden, kan in dit prototype met ANIMO wel een directe belasting op het oppervlaktewater worden berekend.

Ad 7. POSTMSW, gebruikt in Stap 6, is in zijn huidige vorm volledig 1D en gaat er in deze koppeling dus van uit dat er geen laterale lektermen aanwezig zijn. Dit 1-dimensionale karakter betekent dat *sinks* en *sources* (winningen, drains, waterlopen, en randvoorwaarden als “constant head cells” en “general head boundaries”) uit MODFLOW, en de fluxen die het gevolg zijn van deze *sinks* en *sources*, niet worden meegenomen in POSTMSW. Dit is geen probleem voor het domein onder het grensvlak, omdat voor dit domein niet de POSTMSW uitvoer maar de MODFLOW-uitvoer gebruikt wordt. Als de *sinks* en *sources* zich echter in MODFLOW-lagen 1 en 2 bevinden, waar de hydrologie vervangen wordt door de POSTMSW uitvoer, zouden ze zonder volledig verloren gaan.

Een manier om dit probleem het hoofd te bieden zou kunnen zijn om de betreffende *sinks* en *sources* in MetaSWAP in te brengen i.p.v. in MODFLOW, en POSTMSW met deze features rekening te laten houden, waardoor de fluxen die het gevolg zijn van deze *sinks* en *sources* terecht komen in laterale termen van de quasi-2D SWAP-hydrologie. SIMGRO-7 bezit een dergelijke functionaliteit. Afhankelijk van de ruimtelijke schaal van de modeltoepassing kunnen daar bezwaren aan kleven of kan het soms voordelen opleveren. In deze uitwerking van de modelkoppeling is echter voor de volgende aanpak gekozen:

Alle *sink* en *source* features worden in MODFLOW meegenomen en worden aan MODFLOW-lagen en -kolommen toegekend op basis van hun fysieke ligging. De MODFLOW fluxen die in de MODFLOW-MetaSWAP simulatie gegenereerd worden in het domein boven het grensvlak (dus in MODFLOW lagen 1 en 2) worden *voor de verzadigde waterkolom* gedesaggregeerd naar de SWAP discretisatie en op deze manier dus overgebracht naar het SWAP domein. Deze fluxen “overrulen” dus de POSTMSW-uitvoer voor het verzadigde gedeelte van de waterkolom, terwijl de POSTMSW-uitvoer voor het onverzadigde gedeelte (m.u.v. de freatische laag) intact blijft. Dit principe wordt in Figuur 2.2 geïllustreerd en hieronder verder uitgelegd.

MODFLOW lagen 1 en 2 worden in deze desaggregatie beschouwd als één Box. Dit is gedaan omdat in MODFLOW alleen aan Laag 1 een freatische bergingscoëfficiënt wordt toegekend, zodat alle bergingsveranderingen aan Laag 1 worden toegeschreven, ook als de grondwaterstand zich in laag 2 bevindt en dus ook Laag 2 bijdraagt aan de bergingsverandering. Door Laag 1 en 2 als één Box te beschouwen doet het er niet meer toe waar de bergingsverandering precies optreedt: deze treedt in ieder geval altijd op in de Box en dit vergemakkelijkt het opstellen van massabalansen. Fluxen die de Box binnenkomen en verlaten zijn dus over Laag 1 en 2 gesommeerde fluxen.



Figuur 2.3. Illustratie van het desaggregeren van de MODFLOW fluxen in de Box en het overbrengen van deze fluxen naar het SWAP domein. LGS = Laagste grondwaterstand van de simulatie.

Alle fluxen van en naar *sink-source features* als winningen, drains, general head boundaries, waterlopen en constant head cells, worden evenredig naar verzadigde laagdikte verdeeld over de SWAP-lagen tussen de actuele grondwaterstand en het grensvlak. In Figuur 2.3 is het voorbeeld van een zwakke *sink* in MODFLOW-laag 2 gegeven. De gedesaggregeerde verliesfluxen, die het gevolg zijn van deze winning, zijn weergegeven als groene zijwaartse pijlen in Figuur 2.3. De bergingsveranderingen (watergehaltes) van alle SWAP-lagen worden onveranderd overgenomen uit de POSTMSW uitvoer. De verticale fluxen tussen de SWAP-lagen tussen het freatische niveau en worden vervolgens als sluitterm behandeld om de massabalansen van de SWAP-compartimenten kloppend te krijgen (de groene verticale pijlen in Figuur 2.3).

Omdat de desaggregatie van de MODFLOW-fluxen alleen betrekking heeft op het verzadigde deel van het domein boven het grensvlak, worden de met POSTMSW gegenereerde SWAP fluxen onveranderd overgenomen voor de SWAP-lagen boven het freatische niveau (gele pijlen). In deze lagen blijft de stroming namelijk strikt 1D. De massabalansen in deze compartimenten zijn in POSTMSW kloppend gemaakt. De verticale flux over het grensvlak blijft gelijk aan de door MODMSW berekende flux over dit grensvlak.

Samenvattend is de procedure in ANIMO-RT3D 1.0 als volgt:

- alle verticale fluxen vanaf de bovenkant van de freatische SWAP laag en hoger door POSTMSW worden berekend (gele pijlen);
- alle verticale fluxen vanaf de onderkant van de freatische SWAP laag en lager door desaggregatie van de MODFLOW fluxen worden berekend (groene verticale pijlen);
- dat alle massabalansen van de SWAP-compartimenten kloppend zijn gemaakt, *behalve nog die van het freatische SWAP-compartiment.*

De massabalansen van de freatische laag zou automatisch exact kloppen indien de totale bergingsverandering in het domein boven het grensvlak door MODMSW en POSTMSW exact gelijk zouden zijn berekend. Omdat het door POSTMSW gedesaggregeerde vochtprofiel echter een benadering, een soort interpolatie is van de grovere informatie uit MODMSW, is deze bergingsverandering steeds licht afwijkend. Deze afwijking komt in bovenstaande desaggregatietechniek volledig in de freatische SWAP-laag terecht. In tot nu toe uitgevoerde testberekeningen is deze fout echter steeds erg klein geweest waardoor deze fout vooralsnog niet als problematisch wordt gezien. Het verdient echter aanbeveling de massabalansen van de freatische SWAP-laag, en de massabalansfouten die hierin ontstaan, nauwlettend in de gaten te houden bij komende modeltoepassingen. Een belangrijk hulpmiddel daarbij is het ANIMO-uitvoerbestand animointermediate.OUT, dat per tijdsstap, per laag en per massabalansterm het resultaat van de hierboven uitgelegde desaggregatie weergeeft. Ten opzichte van het originele uitvoerbestand animointermediate.OUT, zoals geproduceerd door ANIMO 4.0, zijn omwille van ANIMO-RT3D aan dit bestand ook o.a. de termen die het gevolg zijn van de MODFLOW sink-source features (winningen, drains, waterlopen, constant head cells en general head boundaries) aan toegevoegd. In Hoofdstuk 4 wordt in meer detail ingegaan op het uitvoerbestand animointermediate.OUT. De beschrijving van dit bestand in Hoofdstuk 4 is complementair aan de hierboven gegeven uitleg en de lezer wordt daarom naar deze beschrijving verwezen voor verdere verduidelijking van de desaggregatie.

3 Chemie

3.1 Oplossing van transport en reacties in ANIMO en RT3D

In ANIMO worden transport en reacties per stof geïntegreerd opgelost. Voor de oplossing van de *convection-dispersion equation* (CDE) worden pseudo-analytische benaderingen gebruikt waardoor de oplossing altijd stabiel is en de door de gebruiker ingestelde tijdstap kan worden gehanteerd. In dit schema wordt ervan uitgegaan dat de natuurlijke dispersie wordt gesimuleerd door de numerieke dispersie die optreedt als gevolg van de keuze van de compartimentdikte. Hiermee hangt de dispersie alleen af van: i) de compartimentdiktes; ii) de gekozen tijdstap; iii) de stofconcentraties in het ontvangende compartiment en in het bovenstrooms gelegen compartiment. In het rekenschema wordt de gecombineerde CDE met reactietermen compartment voor compartment opgelost.

In RT3D worden transport en de reacties van stoffen afzonderlijk doorgerekend. Eerst wordt het transport doorgerekend (de gebruiker kan kiezen tussen verschillende oplossingsschema's, zowel impliciet als expliciet) en vervolgens worden door de gebruiker gemodelleerde reacties doorgerekend (altijd impliciet). Voor de stabiliteit van de transportberekening deelt het model zelf de tijdstappen in kleinere deeltijdstappen. In tegenstelling tot het ANIMO-concept wordt transport in afzonderlijke deeltijdstappen doorgerekend en wordt het niet als source- of sinkterm meegenomen binnen de reactiemodule.

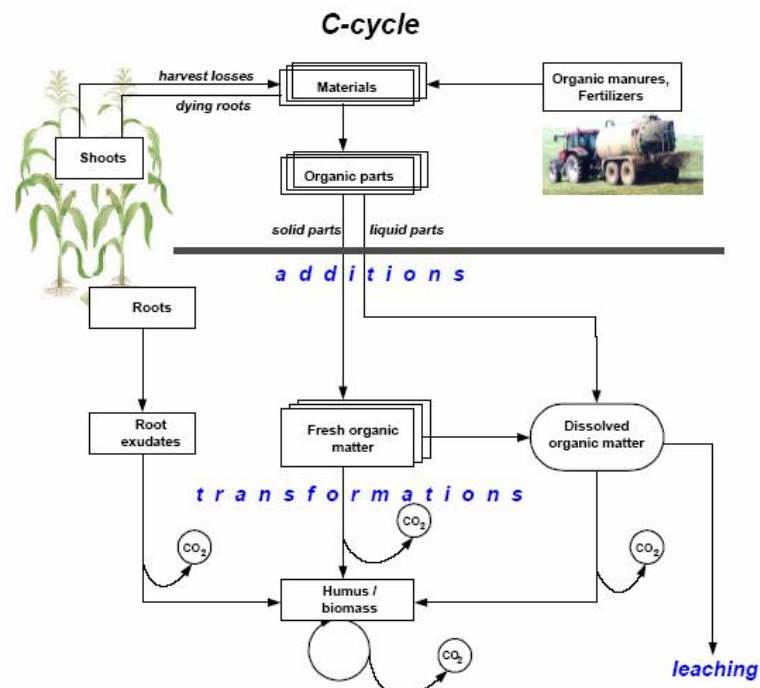
3.2 Stofkringlopen in het ANIMO-domein

Voor een gedetailleerde beschrijving van de chemie in het ANIMO-domein wordt verwezen naar Groenendijk et al. (2005). De ANIMO versie die gekoppeld is aan RT3D is ANIMO 4.0, waarvan de procesbeschrijvingen in detail uiteengezet worden in dit Alterra-rapport. Vele aspecten van de ANIMO-chemie komen overigens wel terug in de bespreking van de chemiëmodelleren in RT3D (zie volgende sectie) en in de beschrijving van het stromingsschema van ANIMO in Hoofdstuk 4. Volledigheidshalve worden hier wel de schematische weergaven van de gemodelleerde stofkringlopen, zoals deze ook in Groenendijk et al. (2005) staan, gegeven. Figuur 4.1. geeft de gemodelleerde kringloop voor organisch materiaal, Figuur 4.2. voor stikstof, en Figuur 4.3 voor fosfor.

3.3 Stofkringlopen in het RT3D-domein

3.3.1 Vereenvoudigende aannames t.o.v. de ANIMO-chemie

Het RT3D-domein is per definitie permanent verzadigd. Bovendien zal het RT3D domein zich vanwege zijn definitie vrijwel altijd op een zekere afstand van het maaiveld bevinden. Dit heeft consequenties voor de zinvolheid van het overbrengen van bepaalde ANIMO-processen naar het RT3D domein. Processen die zonder voldoende aeratie niet kunnen optreden hoeven niet in RT3D opgenomen te worden. Wortelzone-gerelateerde processen zullen evenmin relevant zijn. Het landbouwmanagement en inputs aan het maaiveld (e.g. droge depositie, begrazing) grijpen niet direct in op het RT3D domein en hoeven daarom niet in RT3D ingebouwd te worden.



Figuur 4.1. De organische koolstofcyclus zoals gemodelleerd in ANIMO 4.0. Bron: Groenendijk et al. (2005).

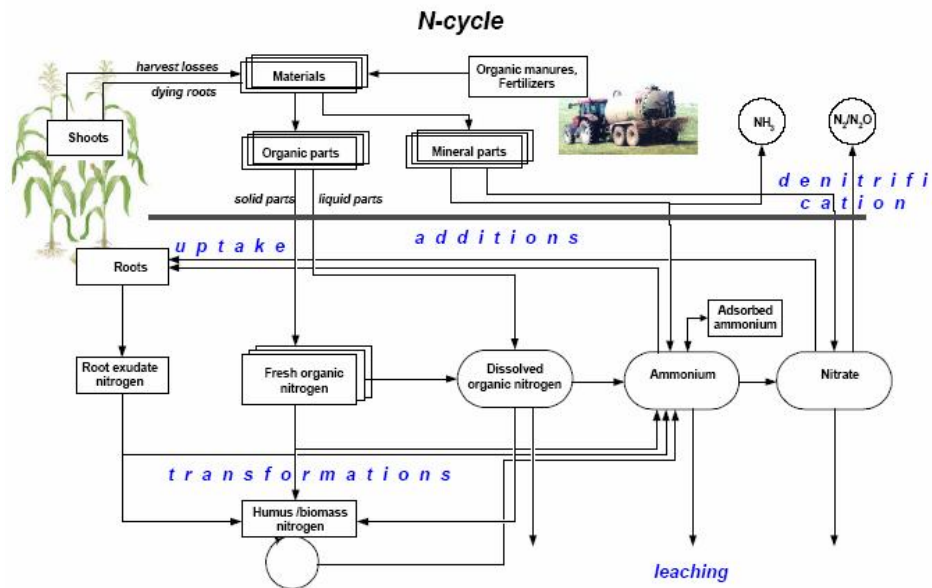
Bij het overbrengen van de ANIMO-chemie naar het RT3D domein zijn de volgende aannames gemaakt:

- De aeratie in het RT3D domein is altijd gelijk aan nul. Afbraak van organische verbindingen vindt alleen plaats onder invloed van nitraatzuurstof. Dit houdt o.a. in dat de reductiefactor die in ANIMO wordt toegepast op omzettingssnelheden van organische verbindingen in (gedeeltelijk) anaerobe omstandigheden (zie Groenendijk et al., 2005, p. 63) altijd van toepassing wordt geacht.
- Er is geen bodem-plant interactie in RT3D (geen nutriëntenopname door planten, geen afsterving van planten).
- In het RT3D domein bevinden zich geen wortels, wortellexudaten en verse organische stof, ook niet initieel. Dit heeft o.a. tot gevolg dat er geen productie van opgeloste organische stof plaatsvindt, alleen afbraak en assimilatie in humus/biomassa.
- In het RT3D domein vindt geen nitrificatie plaats. Dit is consistent met de aanpak in ANIMO: nitrificatie vindt daar alleen plaats in niet volledig verzadigde bodemlagen. Het RT3D domein is per definitie permanent verzadigd.
- In het RT3D domein is de temperatuur een constante.
- Het landbouwmanagement en inputs als droge depositie en begrazing grijpen alleen in op ANIMO en kunnen alleen via de door ANIMO aan RT3D doorgegeven bovenrandvoorwaarde doordringen naar het RT3D domein.

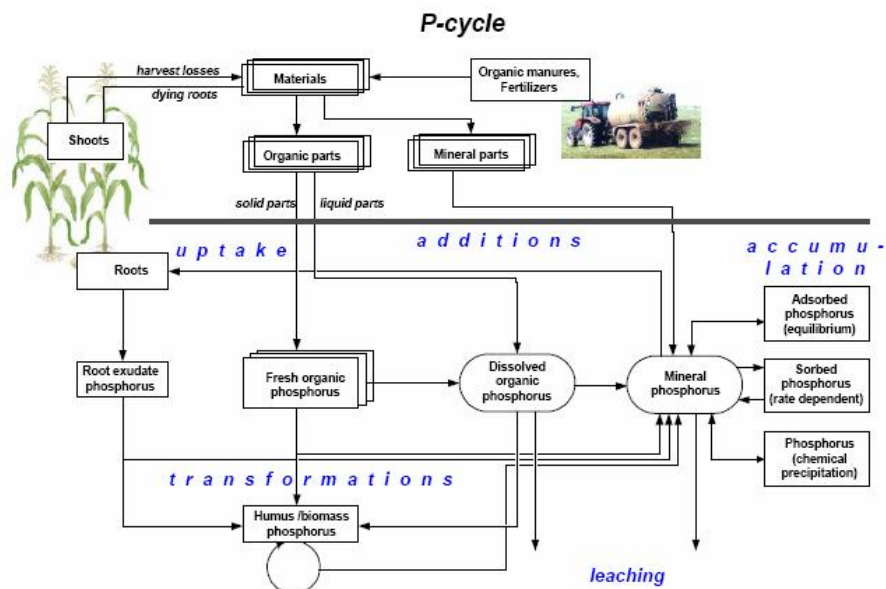
3.3.2 Reactievergelijkingen

Zoals in het vorige hoofdstuk reeds is vermeld worden tussen ANIMO en RT3D 6 verschillende opgeloste stoffen uitgewisseld:

- 1) Nitraat (NO_3)
- 2) Ammonium (NH_4)
- 3) Fosfaat (PO_4)
- 4) Opgelost organische stof (DOM)
- 5) Opgelost organisch stikstof (N-DOM)



Figuur 3.2. De stikstofcyclus zoals gemodelleerd in ANIMO 4.0. Bron: Groenendijk et al. (2005).



Figuur 3.3. De fosforcyclus zoals gemodelleerd in ANIMO 4.0. Bron: Groenendijk et al. (2005).

6) Opgelost organische fosfaat (P-DOM)

In RT3D wordt (naast geadsorbeerd fosfaat en ammonium) één immobiele stof gemodelleerd:

7) Humus/biomassa

Nog niet geïmplementeerd zijn de twee verse organische stoffracties waarmee in ANIMO 4.0 eutroof en oligotroof veen worden beschreven. Dit wordt voorzien in een volgende modelversie.

Per stof zullen hieronder de in het RT3D domein relevant geachte en gemodelleerde processen worden beschreven.

Organische verbindingen

In RT3D worden twee typen organische verbindingen onderscheiden: de immobiele humus/biomassa pool en de mobiele opgeloste organische verbindingen DOM, DON en DOP.

In het RT3D domein worden organische verbindingen alleen omgezet met nitraat als oxidator (denitrificatie). De omzettingssnelheden zijn dus afhankelijk van de denitrificatiesnelheid. Deze denitrificatiesnelheid is op haar beurt weer afhankelijk van de orde van het denitrificatieproces, i.e. of denitrificatie als een 0^e orde of als een 1^e orde proces verloopt. In het eerste geval wordt denitrificatie gelimiteerd door de concentraties en gehalten van de organische verbindingen. In dat geval verloopt de omzetting van de organische verbindingen als een 1^e orde proces. Voor de opgeloste organische verbindingen:

$$F_R = f_T * f_{pH} * f_{ae}$$

$$\frac{d[DOM]}{dt} = F_R k_{DOM} [DOM] \quad (3.1)$$

$$\frac{d[DON]}{dt} = F_R k_{DOM} [DON] \quad (3.2)$$

$$\frac{d[DOP]}{dt} = F_R k_{DOM} [DOP] \quad (3.3)$$

waarbij

[] = concentratie (kg stof /m³ water);

t = tijd (d);

k_{DOM} = afbraaksnelheidsconstante voor de afbraak van organische verbindingen (d⁻¹);

F_R = reductiefactor voor de afbraaksnelheid van organische verbindingen, welke afhangt van pH, temperatuur en aeratie (-);

f_T = reductiefactor voor de afbraaksnelheid van organische verbindingen die de invloed van de temperatuur weergeeft (-)

f_{pH} = reductiefactor voor de afbraaksnelheid van organische verbindingen die de invloed van de zuurgraad weergeeft (-);

f_{ae} = reductiefactor voor de afbraaksnelheid van organische verbindingen die de invloed van de aeratie weergeeft (-). In RT3D wordt de invoerwaarde voor de afbraaksnelheidsconstante van organische verbindingen standaard met 0.5 vermenigvuldigd i.v.m. de afwezigheid van aeratie (alleen nitraatzuurstof is beschikbaar voor de afbraak van organische verbindingen). Ofwel f_{ae} is standaard 0.5.

Voor humus/biomassa geldt dat de netto concentratieverandering een combinatie is van afbraak van humus/biomassa o.i.v. denitrificatie, de daarmee gepaard gaande assimilatie, en de assimilatie die gepaard gaat met de afbraak van opgeloste organische stof. Dit resulteert in de volgende productieterm, waarin de eerste twee genoemde processen gelumped zijn weergegeven:

$$\frac{d[HU]}{dt} = -F_R k_{HU} [HU] + \frac{a_{DOM}}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} F_R k_{dom} [DOM]_t dt \quad (3.4)$$

waarbij

k_{HU} = afbraaksnelheidsconstante voor de afbraak van humus/biomassa (d^{-1}).

a_{DOM} = assimilatie/dissimilatie ratio voor de afbraak van DOM (-);

Indien niet de concentraties en gehalten aan organische verbindingen limiterend zijn voor de organische omzettingen, maar de nitraatconcentratie, verlopen de organische omzettingen minder efficiënt. De omzettingen gaan nu via een 1^e orde proces, wat resulteert in een verdere reductie van de omzettingssnelheden. Bovenstaande omzettingsreacties voor opgeloste organische stof en humus/biomassa gelden nog steeds, maar de reductiefactor voor de afbraak van de organische verbindingen wordt nu als volgt berekend:

$$F_R = f_T * f_{pH} * f_{ox} \quad (3.5)$$

$$f_{ox} = \frac{\frac{d[NO_3]}{dt}}{24/30 * 14/12 * 0.58} * \Omega^{-1} \quad (3.6)$$

$$\Omega = \left\{ (1 - a_{DOM}) * f_T * f_{pH} * k_{DOM} * [DOM] \right\} + \left\{ a_{DOM} * f_T * f_{pH} * k_{DOM} * [DOM] + \frac{\Delta[HU]}{\Delta t} \right\}$$

De berekening van f_{ox} (Verg. 3.6) is niets anders dan de stoichiometrische vertaling van de denitrificatiesnelheid ($d[NO_3]/dt$) naar de afbraak van de koolstofverbindingen, waarbij het resultaat, ter verkrijging van een reductiefactor, gedeeld wordt door de respiratie (Ω) zoals die plaats zou vinden in het geval nitraat niet limiterend zou zijn. Het quotiënt 24/30 staat voor de stoichiometrische molaire nitraatvraag voor de oxidatie van 1 mol koolstof (C), het quotiënt 14/12 voor de gewichtsratio tussen stikstof (N) en koolstof (C), en de constante 0.58 voor de schatting van het organisch C-gehalte op gewichtsbasis (droge stof) van DOM.

In de berekening van Ω (Verg. 3.6) staat het eerste deel voor de respiratie van DOM, en het tweede deel voor de respiratie van humus/biomassa. Verg. 3.6. kan nog vereenvoudigd worden tot:

$$\Omega = f_T * f_{pH} * k_{DOM} * [DOM] + \frac{\Delta[HU]}{\Delta t} \quad (3.7)$$

Nitraat

Wat betreft nitraat wordt in het RT3D domein aangenomen dat alleen verlies als gevolg van denitrificatie van belang is. Er vindt dus geen productie meer plaats van nitraat als gevolg van nitrificatie van ammonium.

In de huidige versie van de ANIMO-RT3D koppeling treden alleen opgelost organisch materiaal (DOM) en/of humus/biomassa op als electronendonor voor het denitrificatieproces. Een extra (doch eenvoudige) programmeeractie is dus noodzakelijk indien het gewenst is ook rekening te houden met voorraden pyriet die geoxideerd kunnen worden.

Het pad waarlangs denitrificatie optreedt wordt op eenzelfde manier in RT3D gemodelleerd als in ANIMO. Zoals bij de bespreking van de omzettingen van de organische verbindingen

reeds is vermeld worden er twee verschillende situaties onderscheiden: een situatie waarin de beschikbaarheid van nitraat limiterend is voor de denitrificatiesnelheid, en de situatie waarin de zuurstofvraag van de afbraak van DOM limiterend is. In het laatste geval wordt denitrificatie gemodelleerd als een nulde orde proces waarvan de snelheid een functie is van de DOM-concentratie:

$$\frac{d[NO_3]}{dt} = -0.58 * \frac{24}{30} * \frac{14}{12} * [(1 - a_{DOM})F_R k_{DOM}[DOM] + (1 - a_{HU})F_R k_{HU}[HU]] \quad (3.8)$$

waarbij

a_{HU} = assimilatie/dissimilatie ratio voor de afbraak van humus/biomassa (-).

Indien nitraat echter limiterend is voor het denitrificatieproces, wordt denitrificatie gemodelleerd als een eerste orde afbraakproces waarvan de snelheid afhangt van de nitraatconcentratie :

$$\frac{d[NO_3]}{dt} = -k_{den}[NO_3] \quad (3.9)$$

waarbij:

k_{den} = denitrificatiesnelheidsconstante (d^{-1}).

De keuze tussen de twee processen wordt op celbasis gemaakt door de resulterende nitraatconcentratie voor beide processen te evalueren. Het proces met de hoogste resulterende nitraatconcentratie (dus het meest gelimiteerde proces) wordt vervolgens geselecteerd. Hoofdstuk 4 gaat hier verder op in.

Ammonium

In het RT3D domein worden zowel sorptie van ammonium als productie van ammonium als gevolg van afbraak van opgelost organisch materiaal relevant geacht. Verlies van ammonium als gevolg van nitrificatie wordt, zoals hierboven reeds gemeld, niet meegenomen.

In ANIMO wordt sorptie van ammonium gemodelleerd met een lineaire sorptieisotherm (evenwichtssorptie). Normaal gesproken wordt evenwichtssorptie in RT3D gemodelleerd met behulp van een retardatiecoëfficiënt. In RT3D kan standaard echter maar één type evenwichtssorptie (Lineair, Freundlich of Langmuir) gekozen worden welke dan direct voor alle gemodelleerde stoffen geldt, terwijl in de ANIMO-RT3D-chemie zowel lineaire evenwichtssorptie (van ammonium) en Langmuir evenwichtssorptie (van fosfaat) spelen. Om grote aanpassingen aan de broncode van RT3D te voorkomen is ervoor gekozen in ANIMO-RT3D de evenwichtssorptie niet met een retardatiecoëfficiënt te modelleren, maar binnen de reactiemodule van RT3D te modelleren als een zeer snelle reactie tussen de opgeloste en geadsorbeerde fase. Voor de lineaire evenwichtssorptie van ammonium ziet dit er als volgt uit:

$$\frac{d[NH_4]}{dt} = -k_{sorp,NH_4} \left\{ [NH_4] - \frac{X_{NH_4}}{K_d} \right\} \quad (3.10)$$

waarbij

k_{sorp,NH_4}	=	reactiesnelheidsconstante voor de sorptie van ammonium
	(d^{-1}).	
$[X_{NH_4}]$	=	concentratie geadsorbeerd ammonium ($kg.kg^{-1}$).
K_d	=	ammonium distributiecoëfficiënt ($m^3.kg^{-1}$).

Uit Verg. (3) blijkt dat, anders dan wanneer er met een retardatiecoëfficiënt gewerkt zou worden, de concentratie van de geadsorbeerde (immobiele) fase bijgehouden moet worden. De differentiaalvergelijking voor de geadsorbeerde fase ziet er als volgt uit:

$$\frac{d[X_{NH_4}]}{dt} = \frac{nk_{sorp,NH_4}}{\rho} \left\{ [NH_4] - \frac{X_{NH_4}}{K_e} \right\} \quad (3.11)$$

waarbij

n	=	porositeit (-)
ρ	=	droge bulkdichtheid ($kg.m^{-3}$)

Productie van ammonium (positief indien netto mineralisatie, negatief indien netto assimilatie/immobilisatie) wordt gemodelleerd als een 0^e orde proces, gestuurd door de veranderingen in de concentraties en gehalten van de organische verbindingen:

$$R_{p,NH_4} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \left((k_{DOM} ([DON]_t - a_{DOM} f_N^{HU} [DOM]_t)) + f_N^{HU} k_{HU} [HU]_t \right) dt \quad (3.12)$$

waarbij

R_{p,NH_4}	=	0 ^e orde productie van ammonium gedurende de transportstap ($kg \text{ stof}/(m^3 \text{ water} * d)$)
t_0	=	begin van de transportstap (d);
Δt	=	lengte van de transportstap (d);
$[DON]_t$	=	concentratie van opgelost organische stikstof op tijdstip t ($kg \text{ stof}/m^3 \text{ water}$);
$[HU]_t$	=	concentratie van humus/biomassa op tijdstip t (omgerekend naar $kg \text{ stof}/m^3 \text{ water}$);
f_N^{HU}	=	stikstoffractie van humus/biomassa (-)

In geval van immobilisatie ($R_{p,NH_4} < 0$) wordt, als de hoeveelheid ammonium niet voldoende is om aan de immobilisatievraag te voldoen, de assimilatieverhouding a_{DOM} gereduceerd en wordt R_{p,NH_4} opnieuw berekend. In Hoofdstuk 4 wordt hierop teruggekomen.

Fosfaat

Wat betreft fosfaat worden alle in ANIMO gemodelleerde processen tevens relevant geacht voor het RT3D domein. Deze processen zijn: evenwichtssorptie, niet-evenwichtssorptie, en precipitatie. Ook wordt er, op eenzelfde manier als gedaan voor ammonium, productie/consumptie (mineralisatie/immobilisatie) van fosfaat gemodelleerd als een 0^e orde proces als gevolg van de omzetting van organische verbindingen door denitrificatie.

De evenwichtssorptie van fosfaat wordt, net als in ANIMO, aangenomen te verlopen volgens een Langmuir-isotherm. Om hierboven genoemde redenen is deze sorptie niet via een retardatiecoëfficiënt geëffectueerd, maar met behulp van een snelle reactie. Voor Langmuir-sorptie ziet deze reactie er als volgt uit:

$$\frac{d[PO_4]}{dt} = -k_{sorp,PO_4,eq} \left\{ [PO_4] - \frac{X_{PO_4}^{eq}}{K_L (\bar{S} - X_{PO_4}^{eq})} \right\} \quad (3.13)$$

waarin

$k_{sorp,PO_4,eq}$ = reactiesnelheidsconstante voor de evenwichtssorptie van fosfaat (d^{-1}).

$X_{PO_4}^{eq}$ = concentratie via evenwichtssorptie geadsorbeerd fosfaat ($kg.kg^{-1}$)

K_L = Langmuir constante ($m^3.kg^{-1}$).

$\bar{S}$ = totale concentratie van aanwezige sorptie sites ($kg.kg^{-1}$)

De concentratie aan geadsorbeerd fosfaat $X_{PO_4}^{eq}$ wordt bijgehouden via:

$$\frac{dX_{PO_4}^{eq}}{dt} = \frac{nk_{sorp,PO_4,eq}}{\rho} \left\{ [PO_4] - \frac{X_{PO_4}^{eq}}{K_L (\bar{S} - X_{PO_4}^{eq})} \right\} \quad (3.14)$$

Naast Langmuir-evenwichtssorptie wordt in ANIMO, en daarom ook in RT3D, aangenomen dat fosfaat ook een kinetisch sorptieproces ondergaat. Deze kinetische sorptie wordt met een Freundlich-isotherm berekend. De drijvende kracht achter deze kinetische sorptie is, in ANIMO, de discrepantie tussen de geadsorbeerde concentratie welke volgens Freundlich-evenwicht zou moeten gelden, en de werkelijke geadsorbeerde concentratie:

$$\frac{d[X_{PO_4}^{neq}]}{dt} = k_{sorp,PO_4,neq} \{ K_F [PO_4]^a - X_{PO_4}^{neq} \} \quad (3.15)$$

waarbij

$k_{sorp,PO_4,neq}$ = reactiesnelheidsconstante voor de kinetische sorptie van fosfaat (d^{-1}).

$X_{PO_4}^{neq}$ = concentratie kinetisch geadsorbeerd fosfaat ($kg.kg^{-1}$).

K_F = Freundlich constante ($(m^3.kg^{-1})^a$).

a = Freundlich exponent (-).

Dit houdt dan automatisch in dat voor de opgeloste fosfaatconcentratie geldt:

$$\frac{d[PO_4]}{dt} = -\frac{\rho_d}{n} k_{sorp,PO_4,neq} \{ K_F [PO_4]^a - X_{PO_4}^{neq} \} \quad (3.16)$$

Waar in ANIMO drie kinetische sorptiesites voor fosfaat zijn gedefinieerd, is in RT3D, zoals blijkt uit verg. 3.15 en 3.16, vooralsnog slechts één kinetische sorptiesite geïmplementeerd.

Uitbreiding naar drie sites is eenvoudig en wordt voorzien voor de eerstvolgende versie van ANIMO-RT3D.

Productie van fosfaat (positief indien netto mineralisatie, negatief indien netto assimilatie/immobilisatie) wordt gemodelleerd als een 0^e orde proces, gestuurd door de veranderingen in de concentraties en gehalten van de organische verbindingen:

$$R_{p,PO_4} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \left(k_{DOM} ([DOP]_t - a_{DOM} f_P^{HU} [DOM]_t) + f_P^{HU} k_{HU} [HU]_t \right) dt \quad (3.17)$$

waarbij

$$\begin{aligned} R_{p,PO_4} &= && 0^e \text{ orde productie van fosfaat gedurende de transportstap} \\ &&& (\text{kg stof}/(\text{m}^3 \text{ water} * \text{d})) \\ [DOP]_t &= && \text{concentratie van opgelost organische stikstof op tijdstip } t \\ &&& (\text{kg stof}/\text{m}^3 \text{ water}); \\ f_P^{HU} &= && \text{fosfaatfractie van humus/biomassa (-)} \end{aligned}$$

In geval van immobilisatie ($R_{p,PO_4} < 0$) wordt, als de hoeveelheid fosfaat aan het begin van de transportstap niet voldoende is om aan de immobilisatievraag te voldoen, de assimilatiefactor a_{DOM} gereduceerd en wordt R_{p,PO_4} opnieuw berekend. In Hoofdstuk 4 wordt hierop teruggekomen.

Fosfaat precipiteert indien de berekende concentratie groter is dan een bepaalde maximumwaarde (de evenwichtsconcentratie). De precipitatie wordt gemodelleerd als een instantaan proces, waardoor de eindconcentratie van een transportstap nooit hoger kan zijn dan deze maximumwaarde. Als de berekende fosfaatconcentratie, bij aanwezigheid van precipitaat, daalt tot onder de maximumwaarde, lost instantaan zoveel precipitaat op dat de eindconcentratie gelijk is aan de maximumwaarde of alle precipitaat is opgelost.

De reactievergelijkingen voor fosfaatprecipitatie zien er als volgt uit:

$$\frac{d[PO_4]}{dt} = -k_{prec} \delta_1 \{ [PO_4] - [PO_4]_{MAX} \} + k_{diss} \delta_2 (1 - \delta_1) \{ [PO_4] - [PO_4]_{MAX} \} \quad (3.18)$$

$$\frac{d[S_{PO_4}]}{dt} = \frac{n}{\rho_d} k_{prec} \delta_1 \{ [PO_4] - [PO_4]_{MAX} \} - \frac{n}{\rho_d} k_{diss} \delta_2 (1 - \delta_1) \{ [PO_4] - [PO_4]_{MAX} \} \quad (3.19)$$

waarbij

$$\begin{aligned} [PO_4]_{MAX} &= && \text{de evenwichtsconcentratie of maximale} \\ &&& \text{concentratie fosfaat, waarboven fosfaat} \\ &&& \text{precipiteert;} \\ [S_{PO_4}] &= && \text{gehalte precipitaat (kg/kg);} \\ k_{prec} &= && \text{reactiesnelheidsconstante voor de precipitatie van} \\ &&& \text{fosfaat en de oplossing van fosfaatprecipitaat (d}^{-1}\text{).} \\ &&& \text{Deze wordt groot gekozen om evenwicht te simuleren.} \\ \delta_1 \text{ en } \delta_2 &= && \text{S-vormige Kronicker Delta proxyfuncties. Proxys voor de} \\ &&& \text{Kronicker Delta's zijn noodzakelijk om Verg. 3.18 en 3.19} \\ &&& \text{differentieerbaar te houden.} \end{aligned}$$

4 Technische implementatie van de koppeling

4.1 Algemene aspecten

4.1.1 Modelversies

ANIMO-RT3D 1.0 betreft een modelkoppeling tussen de modelversies ANIMO 4.0 en RT3D v2.5.

4.1.2 Timing

In MODFLOW wordt een gesimuleerde periode onderverdeeld in stressperiodes. Dit zijn periodes waarin alle externe stress op het systeem constant is. De stressperiodes kunnen in MODFLOW verder onderverdeeld worden in tijdstappen. De lengte van de tijdstappen kunnen in MODFLOW vrij gekozen worden. In RT3D worden de tijdstappen verder onderverdeeld in transportstappen. Deze kunnen niet vrij gekozen worden, omdat ze afhangen van stabiliteitscriteria voor de transportberekeningen. RT3D bepaalt de lengte van de transportstappen automatisch op basis van deze stabiliteitscriteria. Transportstappen zijn altijd kleiner dan of gelijk aan de tijdstappen, en worden altijd afgekapt op het einde van de tijdstap.

Het rekenschema van ANIMO kent alleen tijdstappen. Transport in ANIMO wordt berekend op dezelfde tijdsintervallen als de hydrologische invoer. Deze hydrologische invoer voor ANIMO bestaat in principe uit dezelfde tijdsintervallen als de hydrologische invoer voor RT3D, omdat beide afkomstig zijn van dezelfde MODMSW-simulatie. De uitvoer van MODMSW is op het niveau van tijdstappen, en deze tijdstappen bepalen dus de tijdsintervallen waar ANIMO mee rekt. Omdat ANIMO normaal gesproken rekt op dagreeksen van hydrologische invoer, wordt voor de MODMSW-simulatie ook normaal gesproken gekozen voor tijdstappen van 1 dag. Tevens is het gebruikelijk te rekenen met dagelijkse meteorologische reeksen, zodat ook de MODFLOW-stressperiodes een lengte hebben van 1 dag. Er kan echter zonder problemen gekozen worden voor langere stressperiodes, waarbij deze dan onderverdeeld kunnen worden in voor ANIMO geschikte tijdstappen.

4.1.3 Wijze van communicatie

Voor gebruik in een expliciet gedistribueerd transportmodel is ANIMO 4.0, wat van origine 1 kolom doorrekent, uitgebreid naar een door de gebruiker gedefinieerd aantal kolommen (overeenkomstig het aantal kolommen in RT3D). ANIMO 4.0 is dus voor ANIMO-RT3D 1.0 gereedgemaakt voor het in serie kunnen doorrekenen van grote aantallen ANIMO-kolommen welke informatie uitwisselen met de corresponderende RT3D-kolommen.

De communicatie tussen ANIMO en RT3D in ANIMO-RT3D 1.0 vindt volledig plaats door middel van wegschrijven en inlezen van bestanden. Via "SLEEP" statements in de codes is bereikt dat op momenten dat het ene model informatie nodig heeft van het andere model om verder te rekenen, het eerstgenoemde model elke seconde controleert of het benodigde bestand inmiddels door het andere model is geproduceerd. Wanneer dit inderdaad het geval is wordt het bestand ingelezen en verwijderd.

4.1.4 Uitwisseling van concentraties

Tussen ANIMO en RT3D worden 6 verschillende opgeloste stoffen uitgewisseld:

- 1) Nitraat
- 2) Ammonium

- 3) Fosfaat
- 4) Opgelost organische stof
- 5) Opgelost organisch stikstof
- 6) Opgelost organisch fosfaat

De uitwisseling vindt plaats op het niveau van de tijdstappen, wat dus normaal gesproken inhoudt dat dit op dagbasis gebeurt. Zoals in Hoofdstuk 2 al is vermeld worden de concentraties steeds van het ene naar het andere model doorgegeven met behulp van overlappende modellen. De concentraties die ANIMO berekent voor de SWAP-laag boven het grensvlak worden direct overgenomen door RT3D in de corresponderende RT3D-laag. Deze fungeren dan als geactualiseerde bovenrandvoorwaarde voor het RT3D-domein. Andersom worden de concentraties die RT3D berekent voor de RT3D-laag onder het grensvlak direct overgenomen door ANIMO in de corresponderende ANIMO-laag. Deze fungeren dan als geactualiseerde onderrandvoorwaarde voor de het ANIMO-domein. Doordat de waterflux over het grensvlak in beide modellen op consequente wijze wordt gemodelleerd (zie Hoofdstuk 2), wordt op deze manier ook de stofflux over het grensvlak automatisch correct en consequent in beide richtingen doorgegeven.

De concentraties die doorgegeven worden zijn altijd de over de tijdstap gemiddelde concentraties. Omdat in RT3D meerdere transportstappen kunnen plaatsvinden binnen één tijdstap, en dus meerdere transportstappen bij kunnen dragen aan de aan ANIMO door te geven gemiddelde concentraties, worden in RT3D na elke RT3D-transportstap de tijdgewogen gemiddelde stofconcentraties berekend. Na het verstrijken van de tijdstap zijn op deze manier de over deze tijdstap gemiddelde concentraties bekend welke aan ANIMO doorgegeven kunnen worden.

Andersom, als ANIMO concentraties doorgeeft aan RT3D en RT3D neemt meerdere transportstappen binnen de betreffende tijdstap, wordt er zorg voor gedragen dat de bovenrandvoorwaarde steeds in elke RT3D-transportstap (dus gedurende de gehele stressperiode van één dag) gelijk blijft aan de door ANIMO doorgegeven daggemiddelde concentraties. Dit wordt geregeld door voor elke RT3D-transportstap de door RT3D zelf berekende concentraties voor de laag boven het grensvlak opnieuw te overschrijven met de door ANIMO doorgegeven concentraties voor de betreffende tijdstap.

4.1.5 Rekenvolgorde

Uit het bovenstaande is gebleken dat ANIMO concentraties doorgeeft aan RT3D welke vervolgens als bovenrandvoorwaarde dienen voor de RT3D-transportstappen die genomen worden binnen de betreffende tijdstap. Andersom geeft RT3D concentraties door aan ANIMO welke vervolgens als onderrandvoorwaarde dienen in ANIMO voor de betreffende tijdstap.

Het is belangrijk dat de opgelegde randvoorwaarden de meest recente informatie reflecteren over de toestand in het andere domein. Ruimtelijke afwisseling tussen infiltratie en kwel over het grensvlak vormt hiervoor een obstakel. Immers, voor infiltrerende modelkolommen moet ANIMO de randvoorwaarde actualiseren, en voor kwellende kolommen moet RT3D dit doen. Indien per tijdstap de twee modellen sequentieel worden uitgevoerd, loopt het ene model altijd achter op het andere en is de randvoorwaarde op geen enkel moment over het gehele modeloppervlak geactualiseerd.

Een oplossing voor dit probleem is gevonden door steeds eerst een ANIMO-simulatie te doen voor de infiltrerende kolommen, vervolgens een RT3D-simulatie uit te voeren, er daarna weer terug te keren naar ANIMO om de kwellende kolommen te simuleren. Dat alles binnen één en dezelfde tijdstap.

In dit schema vangt ANIMO dus de tijdsstap aan. Voor de simulatie van de infiltrerende kolommen heeft ANIMO geen informatie/randvoorwaarde van RT3D nodig. Immers, de concentraties in de laag onder het grensvlak hebben in het geval van infiltrerende kolommen geen invloed op de toestand van deze kolommen.

Nadat ANIMO klaar is met het doorrekenen van de infiltrerende kolommen wordt automatisch RT3D hiervan op de hoogte gesteld en worden de daggemiddelde concentraties die ANIMO berekend heeft voor de laag boven het grensvlak aan RT3D doorgegeven. Alleen dat deel van de randvoorwaarde dat overeenkomt met de infiltratiegebieden wordt hiermee geactualiseerd. Voor het overige deel heeft RT3D geen bovenrandvoorwaarde nodig, omdat concentraties boven het grensvlak in het kwelgebied geen invloed hebben op berekende concentraties eronder. RT3D heeft dan dus alle informatie die het nodig heeft om de betreffende stressperiode door te rekenen.

Als RT3D daarmee klaar is heeft het actuele randvoorwaarden berekend voor de over het grensvlak kwellende ANIMO-kolommen. ANIMO wordt automatisch geïnformeerd dat RT3D de tijdsstap heeft doorberekend en leest de nieuwe randvoorwaarden in waar het vervolgens de kwellende kolommen mee door kan rekenen. Direct daarna gaat ANIMO verder met de volgende tijdsstap en wordt de bovenstaande cyclus herhaald voor het aantal tijdstappen van de simulatie.

4.1.6 Externe fluxen

Met externe fluxen wordt in dit rapport bedoeld de fluxen die het gevolg zijn van sinks en sources van het systeem. Deze waterfluxen worden gemodelleerd in MODFLOW en worden, voor zover ze zich boven het grensvlak bevinden via de in Hoofdstuk 2 besproken desaggregatie vertaald naar quasi-2D lektermen in SWAP/ANIMO. Hierbij vervangen ze de oorspronkelijk in ANIMO aanwezige “drainageniveaus”. Deze drainageniveaus zelf zijn in ANIMO-RT3D 1.0 niet nodig omdat afwatering in MODFLOW wordt gemodelleerd. De quasi-2D lektermen die ze vertegenwoordigen kunnen echter uitstekend gebruikt worden om de lektermen die het gevolg zijn van de externe fluxen uit MODFLOW een plaats te geven. Codetechnisch zijn de uit MODFLOW afkomstige quasi-2D lektermen dus op dezelfde wijze verwerkt in ANIMO als de oorspronkelijke drainageniveaus. In ANIMO-RT3D 1.0 is dit voor de volgende vijf externe fluxen georganiseerd:

- Cellen met constante stijghoogte (in MODFLOW-terminologie: Constant Head Boundaries, CHB);
- Randvoorwaarden die een stijghoogteafhankelijke bronterm of lekterm vertegenwoordigen (in MODFLOW-terminologie: General Head Boundaries, GHB);
- Waterlopen (in MODFLOW-terminologie: Rivers, RIV);
- Drains (in MODFLOW-terminologie: Drains, DRN);
- Winningen (in MODFLOW-terminologie: Wells, WEL);

In ANIMO en in RT3D worden aan bovengenoemde externe fluxen concentraties toegekend. Voor inkomende fluxen (het systeem in) zijn dit vooraf door de modelleur opgegeven waarden, welke per stressperiode kunnen variëren. Deze concentraties worden in de RT3D-invoer opgegeven en automatisch aan ANIMO doorgegeven. Voor uitgaande fluxen (het systeem uit) zijn dit de door ANIMO en RT3D berekende waarden. In dat geval verloopt de toekenning van concentraties aan de lektermen op dezelfde wijze als bij de oorspronkelijke drainageniveaus van ANIMO.

4.2 Flowchart

Figuur 4.1. geeft de flowchart van de ANIMO-RT3D koppeling. De flowchart laat de in de “main” routines aangeroepen subroutines zien. Door de heldere opbouw van zowel ANIMO

als RT3D geven deze “main” routines een volledig beeld van de door beide programma's uitgevoerde handelingen. De groene lijnen in de figuur geven de plaatsen aan waarop de communicatie tussen de twee programma's ingrijpt. De blauw gekleurde velden betreffen nieuwe code die is toegevoegd omwille van de koppeling tussen ANIMO en RT3D.

In het gedeelte van Figuur 4.1 dat ANIMO betreft zijn, om de figuur helder te houden, de interacties met de vegetatie weggelaten. De koppeling heeft geen betrekking op deze interacties omdat deze alleen in ANIMO behandeld worden. Tevens zijn de ANIMO-subroutines die uitvoer betreffen uit de flowchart weggelaten. Om de figuur nog leesbaar te houden zijn niet alle uitvoer-subroutines weergegeven. Alleen de uitvoerroutines die omwille van de ANIMO-RT3D koppeling zijn toegevoegd of aangepast worden vermeld.

In het gedeelte van Figuur 4.1 dat RT3D betreft, is aangenomen dat de tijdsstapintervallen dezelfde zijn als de stressperiode-intervallen.

In sectie 4.2.1 wordt in detail ingegaan op het ANIMO-deel van de flowchart, en in sectie 4.2.2 wordt in detail de het RT3D-deel van de flowchart besproken. Alle in de flowchart vermelde subroutines passeren hierbij de revue. Beide secties zijn voornamelijk bedoeld voor programmeurs die willen voortbouwen op de code van ANIMO-RT3D 1.0.

4.2.1 Uitleg ANIMO

Er wordt aangevangen met een loop over alle ANIMO-kolommen. Per kolom wordt eerst subroutine **Input1** uitgevoerd, welke invoerbestanden opent en de waarden van inputvariabelen voor ANIMO inleest en controleert. In subroutine **Inicalc** vindt vervolgens voor een groot aantal bodem- en teeltgerelateerde invoervariabelen pre-processing plaats, alsmede de bepaling van de te gebruiken parameters m.b.t. de opname van nutriënten door de vegetatie. Aan het einde van de kolom-loop wordt subroutine **Copy** uitgevoerd in modus 1, wat inhoudt dat per ANIMO-kolom alle parameters en variabelen die door het programma onthouden moeten worden om de berekening van de eerste en volgende tijdsstappen mogelijk te maken gekopieerd worden naar nieuwe arrays. Deze arrays worden gevormd door de originele ANIMO arrays van deze parameters en variabelen te kopiëren naar nieuwe arrays die ten opzichte van de originele arrays zijn uitgebreid met een extra dimensie, namelijk het aantal kolommen. Bijvoorbeeld, de array van de nitraatconcentratie (Codiorni(NI), NI = aantal ANIMO-lagen)) wordt per kolom gekopieerd naar de array D_Codiorni(NI,Manc), Manc = aantal ANIMO-kolommen). Subroutine **Copy** voorkomt dat in alle subroutines van ANIMO alle parameters en variabelen die per tijdsstap kunnen veranderen uitgebreid moeten worden met de dimensie van de kolommen.

Alle tijdsafhankelijke parameters en variabelen zijn nu geïnitieerd. In subroutine **Wrtsconc** worden vervolgens de volgende taken verzet:

- RT3D wordt voorzien van de SWAP-discretisatie (dit voorkomt dat een extra invoerbestand voor RT3D aangemaakt moet worden);
- ANIMO ontvangt van RT3D de RT3D-discretisatie (welke afhangt van de SWAP-discretisatie, zie Hoofdstuk 2);
- Deze subroutine projecteert de startconcentraties van alle in RT3D berekende stoffen, alsmede de in RT3D benodigde reactieparameters en de fysische parameters porositeit en bulkdichtheid, op de RT3D discretisatie en schrijft het resultaat per stof/parameter en per laag weg in uitvoerbestanden. Deze uitvoerbestanden dienen vervolgens als invoer van RT3D (alleen als USRINP = 1 (zie Hoofdstuk 5)).

ANIMO start nu de loop over de uit te voeren tijdstappen. Bij aanvang van een nieuw jaar worden enkele jaarsafhankelijke variabelen geïnitieerd in subroutine **Init_yr**. Deze initialisatie vindt plaats in een aparte loop over alle kolommen, waarbij aan het begin van de kolom-loop alle benodigde variabelen van de betreffende kolom in subroutine **Copy** (nu in modus 2) worden teruggelezen naar de oorspronkelijke ANIMO-variabelen. Na het uitvoeren van subroutine **Init_yr** worden alle aanpassingen in de variabelen weer overgezet naar de met de kolomdimensie uitgebreide arrays door Copy in modus 1 uit te voeren, zodat ze bij aanvang van de volgende loop over alle kolommen weer up-to-date beschikbaar zijn.

Een nieuwe tijdstap wordt twee maal doorlopen: één maal voor de kolommen die infiltreren over het grensvlak (Runtype = 1), en één maal voor de kolommen die kwel vertonen aan het grensvlak (Runtype = 2). Er wordt begonnen met Runtype = 1. Subroutine **Interface** wordt uitgevoerd in modus 0 wat inhoudt dat ANIMO de door RT3D gedesaggregeerde MODMSW-fluxen inleest, alsmede de concentraties van de externe fluxen, en de modellaag met het freatisch niveau (per kolom). Deze informatie heeft ANIMO nodig om de infiltrerende kolommen door te kunnen rekenen. Tegelijkertijd beschikt ANIMO nu over de benodigde informatie (fluxen over het grensvlak) om te kunnen beslissen welke kolommen per Runtype doorgerekend moeten worden.

Er wordt weer gestart met een loop over alle kolommen. Echter, in Runtype 1 worden alle kolommen die kwel over het grensvlak vertonen nu overgeslagen. Voor elke infiltrerende kolom vult subroutine **Copy** (modus = 2) alle voor het uitvoeren van de tijdstap benodigde ANIMO-variabelen met de waarden die opgeslagen waren in de met de kolomdimensie uitgebreide arrays. Na het uitvoeren van Copy (2) kunnen de conservering- en transportvergelijkingen (CTE's) van de betreffende kolom voor de huidige tijdstap op de originele ANIMO 4.0-manier, vrijwel zonder code-aanpassingen, doorgerekend worden.

ANIMO 4.0 hanteert bij het oplossen van de CTE's de volgende aanpak:

Allereerst leest en controleert subroutine **Input_hydro** het dynamische gedeelte van de hydrologische invoerbestanden (i.c. de met POSTMSW gedesaggregeerde MODMSW uitvoerbestanden). Het betreft hier o.a. waterdruk, vochtgehaltes en waterfluxen (verdamping en stroming). Deze gegevens zijn alleen relevant voor de freatische laag en hogere lagen, omdat voor het domein daaronder de hydrologie volledig ontleend wordt aan de door RT3D gedesaggregeerde en doorgegeven MODMSW fluxen voor het verzadigde domein (hierboven reeds ingelezen door subroutine **Interface**, modus 0). Subroutine **Hydro_detailed** werkt de nu complete set aan hydrologische termen om voor gebruik in de transportvergelijkingen en voert bovendien controle van de waterbalansen uit, zowel per laag als per kolom.

De hydrologische termen in de CTE's zijn nu voorbereid. Vervolgens wordt gewerkt aan de stoftermen (giften, reacties).

Als voor de betreffende tijdstap in invoerfile Management.inp een landbouwmanagementactie (bemesting, ploegen etc.) is gespecificeerd wordt subroutine **Input_Addit** aangeroepen om de details van deze actie in te lezen (eveneens uit Management.inp) en te controleren. In elke tijdstap wordt subroutine **Addit** aangeroepen om de inputs aan het bodemsysteem te verwerken in de CTE's. Naast de eventueel in Input_addit ingelezen managementacties kunnen dit ook continue bronnen zijn als droge depositie, verliezen door begrazing en afgestorven plantenwortels. De toevoegingen aan de bodem kunnen bovendien (instantaan) gemengd worden over één of meerdere bodemlagen.

Subroutine **Uboundconc** wordt uitgevoerd om de bovenrandvoorwaarde te bepalen voor de concentraties voor ANIMO laag 0 of 1 (afhankelijk van de aanwezigheid van een plassen-reservoir (laag 0) bovenop de bovenste bodemlaag (laag 1)).

In het geval de bodemtemperatuur niet door SWAP wordt aangeleverd (in subroutine **Input_hydro**) wordt deze per laag door ANIMO zelf berekend met behulp van een sinusmodel. Dit model wordt uitgevoerd in subroutine **Temper**. De temperatuur is van invloed op de omzettingssnelheden van de organische pools. Het gezamenlijke effect van de temperatuur en de andere omgevingsvariabelen pH en vochtgehalte op deze reactiesnelheden wordt in subroutine **Rates1** berekend. In Rates1 wordt nog geen rekening gehouden met de actuele zuurstofbeschikbaarheid, deze wordt hierna berekend en verrekend.

Op basis van de aldus gecorrigeerde omzettingssnelheden worden het transport en de omzetting van drie opgeloste organische verbindingen (opgeloste organische stof (DOM), opgelost organische stikstof (DON) en opgelost organisch fosfaat (DOP)) berekend in subroutine **Transca**. Deze berekening vindt dus plaats onder de aanname van maximale aeratie (potentiële afbraak), aangezien de omzettingssnelheden nog niet voor eventueel gelimiteerde zuurstofbeschikbaarheid zijn gecorrigeerd.

De hierboven berekende potentiële omzettingen van de opgeloste organische pools resulteert in een potentiële respiratie (zuurstofvraag), welke berekend wordt in subroutine **Respirate**. In Respirate worden tevens de respiratie berekend die het gevolg is van de omzettingen van de immobiele organische pools, alsmede een eerste schatting van de ammoniumproductie (mineralisatie).

Vervolgens maakt subroutine **Transport** (welke reactief transport uitvoert en voor elke modellaag de gemiddelde concentraties gedurende de tijdsstap berekent, evenals de eindconcentratie van de tijdsstap, de geadsorbeerde hoeveelheid aan het eind van de tijdsstap, en de totale stofflux in en uit de modellaag) een initiële schatting van de zuurstofvraag als gevolg van het nitrificatieproces. De aannames die hier gemaakt worden zijn dat de nitrificatiesnelheid gelijk is aan de invoerwaarde, de ammoniumproductie gelijk is aan de hierboven berekende potentiële productie bij ongelimiteerde zuurstoftoevoer, en er geen denitrificatie plaatsvindt. Dit levert dus een maximale (potentiële) zuurstofvraag voor het nitrificatieproces op.

In subroutine **Aeration_original** wordt, op basis van de in Transport berekende maximale zuurstofvraag van het nitrificatieproces en de in Respirate berekende maximale zuurstofvraag van de afbraak van organisch materiaal, bepaald of er voldoende zuurstof aanwezig is voor de afbraak van de organische verbindingen en of er voldoende nitraat aanwezig is om denitrificatie te laten verlopen als een direct aan de organische stofconcentraties gebonden 0^{de} orde proces. In geval van zuurstoftekort wordt een reductiefactor berekend voor de afbraaksnelheden van de organische verbindingen. In geval van nitraattekort wordt denitrificatie gemodelleerd als een eerste-orde proces (met de door de gebruiker opgegeven snelheidsconstante), dus afhankelijk van de nitraatconcentratie zelf en niet van de organische stofconcentraties. De omzettingssnelheden van de organische pools kunnen nu gecorrigeerd worden voor de actuele zuurstoftoestand, en dit gebeurt in subroutine **Rates2**. Het reactieve transport van de opgeloste organische verbindingen wordt nu opnieuw berekend met deze voor zuurstofbeschikbaarheid gecorrigeerde omzettingssnelheden in subroutine **Transca**. De omzettingen van de immobiele organische pools worden berekend in Subroutine **Miner**. De omzettingen van de opgeloste en immobiele organische pools samen resulteren in een netto productie van NH₄-N / PO₄-P; een positieve productie betekent mineralisatie, en negatieve productie immobilisatie. In het geval de berekende immobilisatie groter is dan de hoeveel NH₄-N / PO₄-P die aan het begin van de tijdsstap aanwezig is, wordt alle aanwezige NH₄-N / PO₄-P geïmmobiliseerd en wordt de netto productie van NH₄-N / PO₄-P nogmaals berekend met een gereduceerde assimilatiefactor. Deze stappen vinden eveneens plaats in de

subroutine **Miner**. Het uiteindelijke resultaat van Miner is een nieuwe inschatting van de 0e orde productieterm van $\text{NH}_4\text{-N}$ en $\text{PO}_4\text{-P}$. Vervolgens wordt subroutine **Transport** aangeroepen om de CTE voor $\text{NH}_4\text{-N}$ op te lossen, met deze nieuwe 0e orde productieterm. Subroutine **Denitr** berekent de 0e orde productieterm van nitraat, welke bestaat uit 1e orde nitrificatie (positief, de 1e orde nitrificatiesnelheidsconstante wordt opgegeven door de gebruiker) en 0e orde denitrificatie (negatief, waarbij de denitrificatie alleen van de nitrificatie wordt afgetrokken in geval van zuurstoftekort, omdat in geval van nitraatgebrek denitrificatie wordt gemodelleerd als een 1e orde proces en dus afhankelijk is van de nitraatconcentratie. In dat geval wordt denitrificatie niet via de 0e orde productieterm in de CTE van nitraat verwerkt, maar heeft het een eigen 1e orde productieterm).

Nu de 0e en 1e orde productietermen van nitraat bekend zijn kan de CTE voor $\text{NO}_3\text{-N}$ opgelost worden, wat plaatsvindt in een nieuwe call naar subroutine **Transport**. De laatste CTE die dan nog opgelost moet worden is die van fosfaat, welke subroutine **Transgen** voor haar rekening neemt.

Nu zijn alle CTE's berekend en zijn dus de gemiddelde –en eindconcentraties, alsmede de geadsorbeerde hoeveelheden van alle stoffen bekend voor de betreffende tijdsstap, voor alle lagen van de kolom. Door subroutine **Copy** uit te voeren in modus 2 worden alle relevante variabelen weer opgeslagen in de met de kolomdimensie uitgebreide arrays voor gebruik in de volgende tijdsstap. Middels de loop over kolommen worden in Runtype 1 de formulering en de oplossing van de CTE's en het bewaren van de relevante variabelen in de gedistribueerde arrays herhaald voor alle over het grensvlak infiltrerende kolommen.

De berekende gemiddelde concentraties van nitraat, ammonium, fosfaat, DOM, DON en DOP worden in subroutine **Interface** (modus 1) doorgegeven aan RT3D, waarna RT3D de betreffende tijdsstap uitvoert met deze concentraties als bovenrandvoorwaarde. Vervolgens wordt in ANIMO de tijd teruggezet op het begin van de tijdsstap, leest ANIMO in subroutine **Interface** (modus = 2) de door RT3D berekende concentraties voor de laag onder het grensvlak in en wordt Runtype 2 uitgevoerd voor de kwellende kolommen met deze ingelezen concentraties als onderrandvoorwaarde.

Daarna wordt direct overgegaan op het doorrekenen van Runtype voor de volgende tijdsstap. Hiervoor hoeft ANIMO niet te wachten op resultaten van RT3D, omdat infiltrerende kolommen geen onderrandvoorwaarde nodig hebben.

4.2.2 Uitleg RT3D

RT3D is modulair van opzet. De verschillende modules worden alleen aangeroepen indien ze door de modelleur onderdeel zijn gemaakt van de simulatie door ze in de invoer “aan te zetten”. De verschillende modules zijn: De ADV module voor advectie, de DSP module voor dispersie, de SSM module voor sink-source mixing, de RCT module voor chemische reacties, en de GCG module voor gebruik van een “Generalized Conjugate Gradient” solver voor de oplossing van geformuleerde matrices. De eerste drie letters van de namen van de subroutines die hieronder en in Figuur 4.1 worden genoemd verwijzen steeds naar de module waartoe ze behoren. Indien de module geen onderdeel is gemaakt van de simulatie, worden de tot deze module behorende subroutines overgeslagen. Uitzonderingen hierop vormen de BTN (Basic Transport) module, welke altijd onderdeel is van de simulatie, en subroutine **ARIAL**, welke is toegevoegd omwille van de koppeling met ANIMO en eveneens altijd onderdeel is van de simulatie. Bovendien verwijst ARI (Animo_RT3D Interface) niet naar een module, maar naar code die de koppeling mogelijk maakt.

RT3D is mooi in te delen in 7 delen: i) Definitie van het probleem en geheugenallocatie; ii) Inlezen en voorbereiden van data die gelden voor de gehele simulatie; iii) Inlezen en voorbereiden van data die per stressperiode kunnen variëren; iv) Inlezen en voorbereiden

van data die per tijdsstap kunnen variëren; v) Voorbereiden van data die per transportstap kunnen variëren; vi) Het doorrekenen van transport; vii) Het toepassen van de reacties. Hieronder wordt het stroomschema van Figuur 4.1. subroutine voor subroutine toegelicht. Hierbij wordt aangenomen dat voor de transporttermen een expliciete solver wordt gebruikt (RT3D biedt hierin een keuze). Reacties worden in RT3D altijd met een impliciete solver opgelost.

i) Definitie van het probleem en geheugenallocatie

Allereerst wordt in subroutine **BTN3DF** de simulatie gedefinieerd door het aantal lagen, kolommen, rijen en stressperiodes in te lezen, alsmede het aantal door te rekenen stoffen (mobiel en immobiel) en de te gebruiken transportopties (advectie, dispersie, sink-source mixing, reactie). In **BTN3AL** wordt vervolgens geheugen gealloceerd voor de basale arrays die nodig zijn voor het model als geheel. Subroutine **FMI3AL** leest de header van de ongeformateerde flow-transport link file waarin essentiële informatie over het stromingsmodel is vermeld.

Per transportoptie wordt, indien de optie aangewend wordt voor de simulatie, geheugen gealloceerd voor de betreffende module. Dit gebeurt in respectievelijk de subroutines **ADV3AL** (voor de advectiemodule), **DSP3AL** (voor de dispersiemodule), **SSM3AL** (voor de sink-source mixing module), **RCT3AL** (voor de reactiemodule) en **GCG3AL** (indien de GCG solver wordt gebruikt). In subroutine **ARI1AL** wordt geheugen gealloceerd voor arrays die zijn toegevoegd omwille van de koppeling met ANIMO.

ii) Inlezen en voorbereiden van data die gelden voor de gehele simulatie

Subroutine **BTN3RP** verzorgt het inlezen en voorbereiden van data en arrays die geldig zijn voor de gehele simulatie en altijd nodig zijn ongeacht welke transportmodules worden gebruikt. **BTN3RP** speelt ook een rol in de communicatie met ANIMO: **BTN3RP** ontvangt de discretisatie van de ANIMO-kolommen, en berekent op basis hiervan de tops en bottoms van deze lagen. Deze tops en bottoms worden samen met die van de RT3D discretisatie teruggestuurd naar ANIMO zodat ANIMO in subroutine **Wrtsconc** de projectie kan uitvoeren van voor RT3D relevante ANIMO-parameters naar het RT3D grid (zie sectie 4.2.1). Deze projecties worden vervolgens weer ingelezen door **BTN3RP**, indien in de RT3D invoer ervoor gekozen wordt de parameterisatie te ontleen aan ANIMO (zie sectie 5.3.1).

Na het uitvoeren van **BTN3RP** wordt, indien de betreffende transportmodule wordt gebruikt, achtereenvolgens in subroutine **ADV3RP** de invoerdata die nodig zijn voor het oplossen van de advectieterm ingelezen en voorbereid, in subroutine **DSP3RP** de dispersieparameters ingelezen en voorbereid, in **RCT3RP** de chemische reactieparameters ingelezen en voorbereid, en in **GCG3RP** de parameters voor de matrixoplossing ingelezen en voorbereid.

iii) Inlezen en voorbereiden van data die per stressperiode kunnen variëren

Subroutine **BTN3ST** leest de data in die de lengtes van de stressperiodes en de tijdsintervallen van de tijdsstappen definiëren. Per stressperiode kunnen de concentraties van de verschillende externe fluxen variëren. Deze worden daarom ingelezen in subroutine **SSM3RP**.

iv) Inlezen en voorbereiden van data die per tijdsstap kunnen variëren

Per tijdsstap kunnen de fluxen van en naar de modelcellen variëren. Subroutine **FMI3RP1** leest daarom elke tijdsstap deze fluxen opnieuw in, en subroutine **FMI3RP2** leest de locaties en de stromingssnelheden van de verschillende externe fluxen in (indien sink-source mixing onderdeel is van de simulatie). Met de fluxen veranderen ook de dispersiecoëfficiënten. Indien dispersie gemodelleerd wordt, worden daarom in subroutine **DSP3CF** de

componenten van de hydrodynamische dispersiecoëfficiënten elke tijdsstap opnieuw berekend.

Omdat de tijdstappen van ANIMO overeenkomen met de tijdstappen van RT3D, vindt de uitwisseling van data tussen de twee modellen op tijdstapbasis plaats. Deze uitwisseling wordt georganiseerd door subroutine **ARI1SR**. Op deze plek in het programma wordt **ARI1SR** allereerst in modus 0 uitgevoerd, wat inhoudt dat RT3D de MODMSW fluxen (ingelezen door **FMI3RP1** en **FMI3RP2**) desaggregeert naar de quasi-2D SWAP/ANIMO hydrologie (zoals beschreven in Hoofdstuk 2) en deze fluxen doorgeeft aan ANIMO. Dit stelt ANIMO in staat de infiltrerende kolommen door te rekenen. Wanneer ANIMO daarmee klaar is stelt het RT3D op de hoogte van de berekende concentraties voor de laag boven het grensvlak welke in de huidige tijdsstap dienen als bovenrandvoorwaarde. Deze berekende concentraties worden ingelezen door subroutine **ARI1SR** in modus = 2 uit te voeren.

v) Voorbereiden van data die per transportstap kunnen variëren

Per transportstap worden steeds nieuwe concentraties voor alle actieve modelcellen berekend. Dit geldt ook voor de laag die als bovenrandvoorwaarde dient (= RT3D laag 2) en waarvoor ANIMO aan het begin van de tijdsstap de voor de gehele tijdsstap geldende concentraties heeft berekend. Deze bovenrandvoorwaarde moet gedurende de gehele tijdsstap gelijk gehouden worden aan de door ANIMO berekende concentraties. Daarom zet subroutine **ARI1FC** de concentraties van laag 2 aan het begin van elke transportstap terug op de door ANIMO berekende en doorgegeven concentraties voor deze laag.

vi) Het doorrekenen van transport

Alle informatie is nu beschikbaar om de huidige transportstap door te rekenen. Nadat subroutine **BTN3SV** nog enkele arrays geactualiseerd en gereset heeft, worden, indien de betreffende modules onderdeel zijn van de simulatie, achtereenvolgens de advectieterm, de dispersieterm en de sink-source mixing term van de transportvergelijking opgelost voor het grid, in respectievelijk de subroutines **ADV3SV**, **DSP3SV** en **SSM3SV**. Dit resulteert in een nieuwe concentratieverdeling (CNEW). Op basis van CNEW worden vervolgens de reacties uitgevoerd.

vii) Het toepassen van de reacties

Er is voor gekozen om met de modellering van de reacties zo dicht mogelijk aan te sluiten bij de processen zoals die in ANIMO worden beschreven. Concreet betekent dit dat in RT3D de ANIMO-subroutines Rates1 t/m Transgen zo direct mogelijk naar de RT3D-modelconcepten zijn overgebracht. Hierbij zijn wel enkele vereenvoudigende aannames gemaakt die verdedigbaar worden geacht voor het permanent verzadigde domein (zie ook Sectie 3.2.1). Omdat deze echter wel tot verschillen met bijv. STONE-resultaten kunnen leiden, en discussies over deze verschillen niet wenselijk zijn, zal in een volgende versie de beschrijving nog meer 1:1 worden overgenomen.

De reacties zoals die mathematisch zijn beschreven in sectie 3.2.2 zijn alle gecodeerd in subroutine **RCTRTSV**. Deze subroutine wordt cel voor cel aangeroepen en de reacties worden ook cel voor cel opgelost (er wordt dus geen matrix opgelost). Het oplossen van de reacties zorgt voor een aanpassing van CNEW.

In subroutine **SAVE_CNEW** (modus = 1) wordt een kopie gemaakt van CNEW. Dit is nodig omdat, net als in ANIMO, bepaalde reactieve processen worden uitgevoerd ter bepaling van optredende mechanismen en omzettingssnelheden. Ook deze processen zijn gecodeerd in **RCTRTSV** en resulteren dus in een aanpassing van CNEW. Omdat de uiteindelijk gekozen processen berekend moeten worden op basis van de CNEW zoals die uit de transportberekeningen (advectie, dispersie en sink-source mixing) volgde, dient deze CNEW bewaard te worden zodat deze te allen tijde opnieuw geraadpleegd kan worden (zie onder).

Na het kopiëren van CNEW wordt allereerst de potentiële respiratie berekend. Daartoe worden successievelijk **RCTRTSV** (modus = 0) aangeroepen om de omzetting van DOM te berekenen op basis van potentiële omzettingssnelheden, **SAVE_CNEW** (modus = 4) aangeroepen om de over de transportstap gemiddelde DOM-concentratie te berekenen, en **HUOSDECAY** om op basis van o.a. deze gemiddelde DOM-concentratie de potentiële respiratie van humus/biomass te berekenen.

Nu de potentiële respiratie bekend is kan de denitrificatiesnelheid berekend worden onder de aanname dat deze als een 0^e orde proces verloopt waarbij de organische stofconcentraties limiterend zijn. Dit wordt gedaan in subroutine **RCTRTSV** (modus = 1). De resulterende nitraatconcentraties worden bewaard in subroutine **FILL_CLIMOR**. CNEW wordt vervolgens voor nitraat hersteld in subroutine **SAVE_CNEW** (modus = 2), zodat subroutine **RCTRTSV** (modus = 2), op basis van de oorspronkelijke CNEW, de denitrificatie kan berekenen als 1^e orde proces, waarbij dus wordt aangenomen dat de nitraatconcentratie limiterend is. De resulterende nitraatconcentraties worden bewaard in subroutine **FILL_CLIMNI**. In subroutine **FILL_CHOICE** wordt bekeken welk denitrificatieproces (0^e orde of 1^e orde) heeft geleid tot de minste reductie in nitraatconcentratie. Dit proces wordt als het meest gelimiteerde proces gezien en gekozen als het regerende denitrificatieproces. In **SAVE_CNEW** (modus = 5) worden de DOM- en nitraatconcentraties hersteld zodat **RTCRTSV** (modus = 3), op basis van de oorspronkelijke CNEW en het gekozen denitrificatieproces, de actuele omzettingssnelheden van de organische verbindingen (DOM en humus/biomassa) kan berekenen en de definitieve eindconcentraties van DOM kan berekenen.

Tegelijkertijd wordt in **RCTRTSV** (modus = 3) alvast de reactieve component van het ammonium- en fosfaattransport (sorptie, precipitatie) berekend, ter voorbereiding van subroutine **MINER**. Hierbij is de 0^e orde productie/consumptie als gevolg van mineralisatie/immobilisatie nog buiten beschouwing gelaten. Deze wordt namelijk door **MINER** herberekend indien gedurende de transportstap niet voldoende ammonium/fosfaat aanwezig is om aan de immobilisatievraag te voldoen.

Als dat het geval is wordt, net als in ANIMO, alle aanwezige ammonium en fosfaat geïmmobiliseerd en worden de 0^e orde productietermen van ammonium en fosfaat (als gevolg van mineralisatie) opnieuw berekend met een aangepaste assimilatiefactor. Het uiteindelijke resultaat van **MINER** is een gecorrigeerde 0^e orde productieterm voor ammonium en fosfaat. Voor het berekenen van de immobilisatievraag aan ammonium en fosfaat is overigens ook de eindconcentratie van humus/biomassa noodzakelijk. Deze wordt tevens berekend in **MINER**, met behulp van de hierboven berekende actuele omzettingssnelheden van humus/biomassa en DOM.

In **SAVE_CNEW** (modus = 3) worden de opgeloste en geadsorbeerde concentraties ammonium en fosfaat hersteld, waarna, ter afsluiting van het reactieve gedeelte van de transportstap, in **RCTRTSV** (modus = 4), het gekozen denitrificatieproces wordt toegepast op nitraat en bovendien de ammonium en fosfaatreacties (sorptie, productie, precipitatie) opnieuw worden uitgevoerd, nu met de gecorrigeerde 0^e orde productieterm.

Indien aan het einde van de huidige transportstap het einde van de tijdsstap nog niet is bereikt, wordt subroutine **ARI1AG** aangeroepen om de over de tot nu toe binnen de tijdsstap uitgevoerde transportstappen gemiddelde concentraties van laag 3 (welke aan ANIMO doorgegeven zullen worden) bij te houden. RT3D moet namelijk de onderrandvoorwaarde voor de kwellende kolommen in ANIMO aanleveren welke geldig is voor de gehele tijdsstap, aangezien de transportstappen in ANIMO gelijk zijn aan de tijdsstappen.

Indien aan het einde van de huidige transportstap het einde van de tijdsstap wel is bereikt, wordt subroutine **ARI1SR** (modus = 2) aangeroepen om de concentraties van laag 3 aan ANIMO door te geven. RT3D gaat dan de volgende tijdsstap in, waar het echter pas mee kan

beginnen nadat ANIMO de infiltrerende kolommen van deze volgeden tijdstappen heeft berekend en RT3D heeft voorzien van de benodigde bovenrandvoorwaarde.

5 Invoer/Uitvoer

Omwille van de koppeling tussen ANIMO en RT3D is de invoer en uitvoer van beide programma's op een aantal punten gewijzigd. De aanpassingen worden in dit hoofdstuk uitgelegd. Ook wordt uitgelegd hoe de directorystructuur opgebouwd dient te worden zodat beide programma's de correcte invoer kunnen vinden. Bovendien wordt aandacht besteed aan hoe de invoerbestanden van RT3D ingevuld moeten worden zodat de invoer correspondeert met de toegevoegde "user-defined" reactiemodule.

5.1 Directorystructuur ANIMO-RT3D

Figuur 5.1 geeft een overzicht van de directorystructuur van ANIMO-RT3D 1.0. Afwijkingen van deze structuur vereisen over het algemeen aanpassingen in de broncode van ANIMO-RT3D. Hard gecodeerde map- en bestandsnamen zijn in Fig. 5.1 onderstreept. De overige map- en bestandsnamen kunnen door de gebruiker zelf gekozen worden.

Een ANIMO-RT3D simulatie wordt uitgevoerd in een bepaalde projectdirectory welke de gebruiker zelf kan benoemen. Deze projectdirectory bevat logischerwijs het batchbestand waarin ANIMO en RT3D worden aangeroepen, al kan dit bestand natuurlijk ook op elke andere plaats op de PC staan zolang de verwijzingen naar de ANIMO- en RT3D-executables maar kloppen.

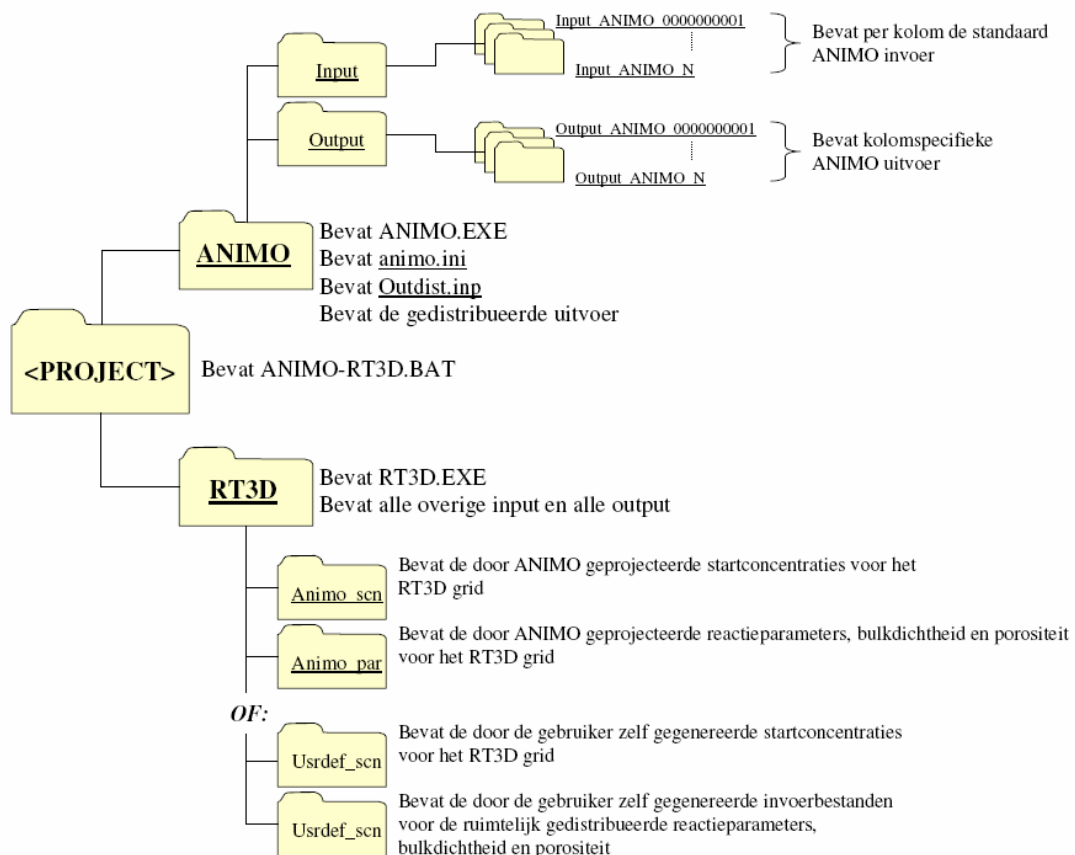
De projectdirectory bevat een map ANIMO en een map RT3D met de in- en uitvoer van de corresponderende modellen.

De map ANIMO bevat ten eerste de ANIMO-executable. Verder staat in de map het bestand animo.ini waarin de namen staan vermeld van alle invoerbestanden. Elke ANIMO-kolom heeft zijn eigen map met invoerbestanden. Deze invoerbestanden hebben echter voor elke kolom dezelfde naam, gedefinieerd in animo.ini. Tevens bevat de map ANIMO het bestand Outdist.Inp waarin keuzes aangegeven worden voor gedistribueerde modeluitvoer en waarin aangegeven wordt voor welke kolommen kolomspecifieke uitvoer is gewenst. In Sectie 5.2. wordt in detail ingegaan op Outdist.Inp. De gedistribueerde uitvoer zelf wordt ook in deze map geplaatst.

De map ANIMO bevat tenslotte een map Input en een map Output, waarin per kolom een submap staat met de kolomspecifieke invoer en uitvoer. Het kolomnummer in de naam van deze mappen bestaat altijd uit een reeks van 10 cijfers, waarin het daadwerkelijke kolomnummer de meest rechtse plaatsen bevat en de loze plekken links van dit nummer met nullen worden opgevuld. Wat betreft de kolomspecifieke invoer geldt dat deze volledig de originele ANIMO 4.0 invoer volgt. In de kolomspecifieke uitvoer zijn wel wijzigingen aangebracht t.o.v. ANIMO 4.0, welke in Sectie 5.2. worden beschreven.

De map RT3D bevat allereerst de RT3D executable. Daarnaast staat in deze map alle RT3D invoer die niet submappen van de map RT3D staan. Ook wordt in deze map alle RT3D uitvoer geplaatst.

De map RT3D bevat twee submappen, waarvan de inhoud afhangt van de keuze van de modelleur voor ofwel parameterisatie van RT3D via automatische projectie van de ANIMO parameterisatie op het RT3D grid (USRINP = 1, zie sectie 5.3.1), ofwel het aanleveren van zelf geproduceerde ASCII-bestanden voor deze parameterisatie (USRINP ≠ 1). Indien gekozen wordt voor automatische projectie van ANIMO data op het RT3D grid bevat de map RT3D de submappen Animo_scn (met de door ANIMO geprojecteerde startconcentraties, per laag en per stof in een apart bestand) en Animo_par (met de door ANIMO geprojecteerde ruimtelijk gedistribueerde reactieparameters en de bulkdichtheid en porositeit, per laag en per parameter in een apart bestand).



Figuur 5.1. Directorystructuur van ANIMO-RT3D 1.0

Indien ervoor gekozen wordt zelf de startconcentraties en de ruimtelijk gedistribueerde parameters aan te leveren d.m.v. ASCII-bestanden, bevat de map RT3D een submap Uxrdef_scn (of een door de gebruiker gekozen naam) met per laag en per stof een ASCII bestand met startconcentraties, en een submap Uxrdef_par (of een door de gebruiker gekozen naam) met per laag en per ruimtelijk gedistribueerde parameter een ASCII bestand met parameterwaarden. In dat geval dienen in RT3D invoerbestand <Project>.RTS de juiste verwijzingen naar deze bestanden te staan (zie Clement (1997), p. 17).

5.2 Invoer/uitvoer ANIMO

5.2.1 Invoer

De invoer voor ANIMO in de ANIMO-RT3D koppeling kan in drie delen worden opgedeeld: het bestand animo.ini, het bestand Outdist.Inp, en de kolomspecifieke ("invoer-per-kolom") invoerbestanden.

Tabel 5.1. Betekenis van invoerarray OUTSE uit het ANIMO-invoerbestand General.Inp

Switch	Uitvoeroptie	Eenheid
OUTSE(1)	Nitrate-N concentration	kg m ⁻³
OUTSE(2)	Ammonium-N concentration	kg m ⁻³
OUTSE(3)	Diss. organic N concentration	kg m ⁻³
OUTSE(4)	Mineral P concentration	kg m ⁻³
OUTSE(5)	Diss. organic P concentration	kg m ⁻³
OUTSE(6)	Moisture fraction	m ³ m ⁻³
OUTSE(7)	Sorbed ammonium-N	kg kg ⁻¹
OUTSE(8)	Mineral N	kg m ⁻²
OUTSE(9)	Solid organic N	kg m ⁻²
OUTSE(10)	Total N	kg m ⁻²
OUTSE(11)	Sorbed P	kg m ⁻²
OUTSE(12)	Sorbed + liquid mineral P	kg m ⁻²
OUTSE(13)	Precipitated P	kg m ⁻²
OUTSE(14)	Solid organic P	kg m ⁻²
OUTSE(15)	Total mineral + organic P	kg m ⁻³
OUTSE(16)	Pw-number	mg P ₂ O ₅ /l
OUTSE(17)	P-AL number	mg P ₂ O ₅ /100
OUTSE(18)	Corg/Norg	-
OUTSE(19)	Corg/Porg	-
OUTSE(20)	Solid mineral phosphorus	kg m ⁻² P
OUTSE(21)	fast sorption pool (1st)	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(22)	fast sorption pool (2nd)	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(23)	fast sorption pool (3rd)	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(24)	rate dep. sorp. pool (1st)	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(25)	rate dep. sorption pool (2nd)	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(26)	rate dep. sorption pool (3rd)	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(27)	rate dep. sorption pools total	kg kg ⁻¹ P
OUTSE(28)	Nitrate-N load to MODFLOW CHB's	kg N/m ²
OUTSE(29)	Nitrate-N load to MODFLOW Wells	kg N/m ²
OUTSE(30)	Nitrate-N load to MODFLOW Drains	kg N/m ²
OUTSE(31)	Nitrate-N load to MODFLOW Rivers	kg N/m ²
OUTSE(32)	Nitrate-N load to MODFLOW GHB's	kg N/m ²
OUTSE(33)	Nitrate-N load to storage	kg N/m ²
OUTSE(34)	Ammonium-N load to MODFLOW	kg N/m ²
OUTSE(35)	Ammonium-N to MODFLOW Wells	kg N/m ²
OUTSE(36)	Ammonium-N to MODFLOW Drains	kg N/m ²
OUTSE(37)	Ammonium-N to MODFLOW Rivers	kg N/m ²
OUTSE(38)	Ammonium-N to MODFLOW GHB's	kg N/m ²
OUTSE(39)	Ammonium-N to storage	kg N/m ²
OUTSE(40)	Phosphate load to MODFLOW CHB's	kg P/m ²
OUTSE(41)	Phosphate load to MODFLOW Wells	kg P/m ²
OUTSE(42)	Phosphate load to MODFLOW Drains	kg P/m ²
OUTSE(43)	Phosphate load to MODFLOW Rivers	kg P/m ²
OUTSE(44)	Phosphate load to MODFLOW GHB's	kg P/m ²
OUTSE(45)	Phosphate load to storage	kg P/m ²
OUTSE(46)	Water flux to MODFLOW CHB's	m/d
OUTSE(47)	Water flux to MODFLOW Wells	m/d
OUTSE(48)	Water flux to MODFLOW Drains	m/d
OUTSE(49)	Water flux to MODFLOW Rivers	m/d
OUTSE(50)	Water flux to MODFLOW GHB's	m/d
OUTSE(51)	Water flux to storage	m/d
OUTSE(52)	Oxygen concentration	m ³ m ⁻³
OUTSE(53)	Aeration fraction	-
OUTSE(54)	Denitrification	kg m ⁻³ d ⁻¹
OUTSE(55)	Time series of water and solute	mm/ha, kg/ha
OUTSE(56)	Dissolved organic matter	kg m ⁻³
OUTSE(57)	Humus/biomass	kg kg ⁻¹

Animo.ini

Het bestand animo.ini is ook een invoerbestand van ANIMO 4.0, waarvan de inhoud niet gewijzigd is in de ANIMO-RT3D koppeling. Hiervoor wordt daarom tevens verwezen naar Renaud et al. (2006) (p. 32).

Kolomspecifieke invoerbestanden

De kolomspecifieke invoer van ANIMO bestaat uit de bestanden:

- General.Inp
- Material.Inp
- Initial.Inp
- Chempar.inp
- Boundary.inp
- Soil.inp
- Plant.inp
- Management.inp
- Swatre.unf (= uitvoer POSTMSW, zie Hoofdstuk 2)

Deze bestanden zijn qua opbouw in ANIMO-RT3D exact gelijk aan de invoer van ANIMO 4.0. Daarom wordt voor een gedetailleerde uitleg van deze bestanden verwezen naar de gebruikershandleiding van ANIMO 4.0 (Renaud et al., 2006). De enige uitzondering betreft de selectie van uitvoeropties in het invoerbestand General.Inp. Dit invoerbestand bevat een integer array OUTSE, dat bestaat uit “switches” waarmee bepaalde uitvoer aan- en uitgezet kan worden. De array OUTSE bevat in ANIMO 4.0 37 uitvoeropties. Omwille van de ANIMO-RT3D-koppeling is het aantal uitvoeropties uitgebreid tot 57 en zijn ook voor enkele uitvoeropties de eenheden gewijzigd. Tabel 5.1 geeft de nieuwe betekenis van de locaties in de array OUTSE, waarbij de gekleurde regels nieuwe uitvoeropties en eenheidswijzigingen aanduiden.

Outdisp.in

Veel belangrijker voor de selectie van uitvoer van ANIMO-RT3D is het bestand Outdist.Inp. Het bestand Outdist.Inp is speciaal toegevoegd omwille van de ANIMO-RT3D-koppeling. Dit bestand betreft de selectie van ruimtelijk gedistribueerde uitvoer, welke in de ruimtelijk gedistribueerde en regionale toepassingen van ANIMO-RT3D veel interessanter zal zijn dan de kolomspecifieke uitvoer. Indien toch kolomspecifieke uitvoer is gewenst, kan in Outdist.Inp tevens een selectie gemaakt worden van kolommen waarvoor kolomspecifieke uitvoer wordt verlangd. Deze selectie is noodzakelijk omdat het wegschrijven van de kolomspecifieke uitvoer voor elke kolom in een regionale toepassing met vele modelkolommen de modelberekeningen sterk kan vertragen en veel schijfruimte kost. Bovendien zal in een regionale toepassing niet elke kolom individueel op uitvoer bekeken hoeven worden. Figuur 5.2 geeft de opbouw van Outdist.Inp weer.

NDIST	
OUTDISTYR, OUTDISTST (NDIST regels)	
OUTSPEC(9)	
OUTBOUND(5)	
OUTOPT(3)	
NKOLOMOUT	
OUTPUTKOLOM(NKOLOMOUT)	
<u>Uitleg Variabelen:</u>	
NDIST	Type: Integer Betekenis: het aantal tijdstippen waarop output wordt verlangd. Dit heeft betrekking op alle met OUTOPT gekozen uitvoeropties Format: FREE
OUTDISTYR	Type: Integer Betekenis: jaartal van gewenst uitvoermoment Format: FREE
OUTDISTST	Type: Integer Betekenis: dagnummer binnen het jaar van het gewenste uitvoermoment Format: FREE
OUTSPEC	Type: Integer Betekenis: selectie van uit te voeren stoffen: Als OUTSPEC(1) = 1: Nitraat-N wordt uitgevoerd Als OUTSPEC(2) = 1: Ammonium-N wordt uitgevoerd Als OUTSPEC(3) = 1: Fosfaat-N wordt uitgevoerd Als OUTSPEC(4) = 1: DOM wordt uitgevoerd Als OUTSPEC(5) = 1: DON wordt uitgevoerd Als OUTSPEC(6) = 1: DOP wordt uitgevoerd OUTSPEC(7-9) zijn nog leeg (dummies invoeren) Format: FREE, reeks van 9 integers
OUTBOUND	Type: Integer Betekenis: selectie van randvoorwaarden (sinks/sources) waarvoor OUTOPT(2) en OUTOPT(3) worden berekend. Als OUTBOUND(1) = 1: uitvoer voor CHB Als OUTBOUND(2) = 1: uitvoer voor WEL Als OUTBOUND(3) = 1: uitvoer voor DRN Als OUTBOUND(4) = 1: Uitvoer voor RIV Als OUTBOUND(5) = 1: Uitvoer voor GHB Format: FREE, reeks van 5 integers
OUTOPT	Type: Integer Betekenis: selectie van uitvoeropties Als OUTOPT(1) = 1: uitvoer van ruimtelijk gedistribueerde concentraties van de met OUTSPEC gekozen stoffen, gemiddeld over alle ANIMO-lagen boven het grensvlak. Als OUTOPT(2) = 1: uitvoer van ruimtelijk gedistribueerde fluxgemiddelde concentraties van de met OUTSPEC gekozen stoffen, behorend bij de fluxen naar de met OUTBOUND gekozen randvoorwaarden. Als OUTOPT(3) = 1: uitvoer van totale (=over het gehele model domein (boven het grensvlak) geaggregeerde) waterflux, totale stofflux en totale fluxgewogen concentraties van de met OUTSPEC gekozen stoffen en voor de met OUTBOUND gekozen randvoorwaarden. Format: FREE, reeks van 3 integers.
NKOLOMOUT	Type: Integer Betekenis: Aantal ANIMO-kolommen waarvoor de originele ANIMO-uitvoer is gewenst. Format: FREE
OUTPUTKOLOM:	Type: Integer Betekenis: Kolomnummers van de ANIMO-kolommen waarvoor de originele ANIMO-uitvoer is gewenst. Format: FREE, reeks van NKOLOMOUT integers

Figuur 5.2. Opbouw van het ANIMO-invoerbestand Outdist.Inp

5.2.2 Uitvoer

De uitvoer van ANIMO is op drie punten gewijzigd t.o.v. de originele ANIMO 4.0-uitvoer:

- De aan de array OUTSE toegevoegde uitvoeropties (zie Sectie 5.2.1). Deze uitvoerbestanden volgen dezelfde structuur als de overige met behulp van OUTSE opgevraagde bestanden en behoeven geen verdere toelichting.
- De ruimtelijk gedistribueerde uitvoer, opgevraagd in invoerbestand Outdisp.Inp. Voor deze uitvoerbestanden geldt dat:
 - de ruimtelijk gedistribueerde concentratievelden (Outopt(1) = 1, zie Fig. 5.2) in ASCII-format worden weggeschreven;
 - de fluxgewogen concentraties van de uittredende externe fluxen (Outopt(2) = 1) in ASCII-format worden weggeschreven, waarbij alleen cellen met de opgevraagde randvoorwaarde een waarde hebben. Hierbij wordt geaggregeerd over alle ANIMO-lagen boven het grensvlak.
 - De tijdsseries van de externe in- of uittredende fluxen in kolomformaat worden weggeschreven. De uitvoerbestanden bestaan uit 4 kolommen, met respectievelijk de tijd (d), de totale waterflux (m/d), de totale vracht (kg/d*m²) en de fluxgemiddelde concentratie (kg/m³). Fluxen, vrachten en fluxgewogen concentraties zijn geaggregeerd over het gehele systeem.

De namen van de uitvoerbestanden zijn hard ingecodeerd en spreken voor zich.

- Animointermediate.OUT. Dit bestand wordt voor elke in Outdist.Inp opgevraagde kolom per tijdstap gevuld door subroutine Output6 (zie Figuur 4.1). Animointermediate.OUT geeft voor de kolom per tijdstap en per modellaag de gehele hydrologische uitvoer: vochtgehaltes, fluxen tussen modellagen en externe fluxen. Bovendien wordt per laag het resultaat van de massabalans weergegeven.

In ANIMO 4.0 zijn externe fluxen geconceptualiseerd als fluxen van en naar 5 verschillende drainageniveaus. In ANIMO-RT3D bestaan deze drainageniveaus niet maar zijn deze vervangen door de MODFLOW-randvoorwaarden: winningen, drains, waterlopen, constant head cells en general head boundaries. Animointermediate.OUT geeft dan ook in ANIMO-RT3D per tijdstap en per modellaag de fluxen van en naar deze MODFLOW-randvoorwaarden, welke dus het resultaat zijn van de in Hoofdstuk 2 besproken desaggregatie van MODMSW-fluxen naar het quasi-2D SWAP-concept. Een voorbeeld van een segment (1 tijdstap) van het bestand Animointermediate.OUT is gegeven in Figuur 5.3. Het betreft de uitvoer voor Kolom 1 van rij 1 van tijdstap 360 van een simulatie met een eendimensionaal model waarin zich boven het grensvlak een drainerende waterloop bevindt. Hieronder wordt dit segment in detail uitgelegd. Deze uitleg geeft een verdere verduidelijking van de desaggregatie van MODMSW-fluxen naar het SWAP/ANIMO domein en is in die zin complementair aan de uitleg van deze desaggregatie in Hoofdstuk 2.

Op de tweede regel van het segment is af te lezen dat in de kolom op de betreffende tijdstap het freatisch niveau (GW Level) op 0.6868100 (m-mv) ligt. In de discretisatie van het gebruikte model komt dit overeen met laag 7 (Ln_Phr = 7). Het grensvlak ligt in deze kolom onder laag 11 (Ln_Intrfc = 11).

Vervolgens volgt een tabel met per laag alle hydrologische termen. Deze worden alleen voor het relevante domein weggeschreven, dus alleen voor de lagen t/m Ln_Intrfc (=11). Voor elke laag worden de begin-, eind- en gemiddelde vochtgehaltes gegeven, de verdampingsflux, en de uitgaande en binnenkomende fluxen. Behalve de uitgaande en binnenkomende fluxen naar resp. van de bovenkant van de laag ("above") en de onderkant van de laag ("below") worden de externe fluxen uit MODFLOW gegeven. Dit zijn: constant head boundaries (CHB), winningen (WEL), drains (DRN), waterlopen (RIV) en general head boundaries (GHB). Dit zijn de termen die in de plaats komen van de originele 5 drainageniveaus van SWAP/ANIMO. Tenslotte wordt, om de waterbalans compleet te maken, de

bergingsverandering (STO) weergegeven. De fouten in de waterbalans worden gegeven in de laatste kolom.

In het gebruikte voorbeeldmodel bevindt zich, zoals gezegd, boven het grensvlak een waterloop. De overige externe MODFLOW-features zijn niet aanwezig. Van de externe fluxen uit MODFLOW laat daarom alleen de kolom "RIV" in Animointermediate.OUT termen ongelijk aan nul zien. Omdat de waterloop gedurende de tijdsstap draineert, zijn alleen uitgaande RIV-termen ongelijk aan nul.

Zoals in Hoofdstuk 2 is uitgelegd grijpt de desaggregatie van de MODMSW-fluxen alleen in op het verzadigde deel van de kolom. In het voorbeeld bevindt het freatische niveau zich in laag 7: RIV-termen ongelijk aan nul bevinden zich daarom alleen in lagen 7 en dieper. Lagen 1 t/m 6 behouden de strikt-1D "SWAP"-hydrologie die door POSTMSW is gegenereerd.

Het verschil in grootte tussen de uitgaande RIV-termen van laag 7 t/m 11 is het directe gevolg van de dikte van gedraineerde laag. Voor de freatische laag (laag 7) is deze dikte gelijk aan het freatisch niveau minus de onderkant van laag 7. Voor de volledig verzadigde lagen is deze dikte uiteraard gelijk aan de dikte van de modellagen. Omdat de dikte van modellaag 11 in het voorbeeldmodel tweemaal zo groot is als de dikte van lagen 9 en 10, is de RIV-term van laag 11 ook tweemaal zo groot.

In de tabel is in de laatste kolom tenslotte af te lezen dat de freatische laag verreweg de grootste balansafwijking laat zien. De reden hiervoor is uitgelegd in Hoofdstuk 2.

Output of Hydro_Detailed: Year = 1990 total time = 360

GW Level 0.6868100 Ln_Phr = 7 Ln_Intrfc = 11

Results of calculations per layer:

LN	Moisture fractions:			Evapotr. flux (m d-1)	Outgoing fluxes to:							above (m d-1)	below (m.d-1)
	start	end	average		CHB	WEL	DRN	RIV	GHB	STO			
	(m3 m-3)				(m.d-1)	(m.d-1)	(m.d-1)	(m.d-1)	(m d-1)	(m d-1)			
1	0.399	0.43	0.414	3.00E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-3.04E-03	0.00E+00	-1.51E-02	
2	0.403	0.429	0.416	3.00E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-2.70E-03	0.00E+00	-1.21E-02	
3	0.389	0.407	0.398	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-1.82E-03	0.00E+00	-1.03E-02	
4	0.405	0.421	0.413	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-1.63E-03	0.00E+00	-8.62E-03	
5	0.411	0.423	0.417	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-1.22E-03	0.00E+00	-7.40E-03	
6	0.416	0.425	0.421	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-8.24E-04	0.00E+00	-6.58E-03	
7	0.422	0.431	0.426	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-3.80E-04	0.00E+00	-8.97E-04	0.00E+00	-4.61E-03	
8	0.433	0.46	0.446	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-2.88E-03	0.00E+00	-2.75E-03	0.00E+00	0.00E+00	
9	0.46	0.46	0.46	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-2.88E-03	0.00E+00	-9.98E-07	-1.02E-03	0.00E+00	
10	0.46	0.46	0.46	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-2.88E-03	0.00E+00	-9.98E-07	-3.90E-03	0.00E+00	
11	0.46	0.46	0.46	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-5.76E-03	0.00E+00	-2.00E-06	-6.78E-03	0.00E+00	

Incoming fluxes from:

CHB	WEL	DRN	RIV	GHB	STO	above	below	Deviations in waterbalance
(m.d-1)	(m.d-1)	(m.d-1)	(m d-1)	(m d-1)	(m.d-1)	(m.d-1)	(m.d-1)	(m.d-1)
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.84E-02	0.00E+00	7.35E-10
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.51E-02	0.00E+00	5.00E-06
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.21E-02	0.00E+00	-3.00E-06
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.03E-02	0.00E+00	-1.00E-06
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	8.62E-03	0.00E+00	3.00E-06
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	7.40E-03	0.00E+00	-4.00E-06
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	6.58E-03	0.00E+00	6.93E-04
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	4.61E-03	1.02E-03	1.75E-09
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	3.90E-03	-7.45E-09
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	6.78E-03	2.79E-09
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.25E-02	3.45E-08

Figuur 5.3 Voorbeeldsegment van het ANIMO-
uitvoerbestand Animointermediate.OUT.

5.3 Invoer/uitvoer RT3D

5.3.1 Invoer

De invoerstructuur van RT3D is op twee bestanden na exact gelijk aan de originele RT3D v2.5 invoerconventies (zie Clement (1997; 2003)). Voor twee bestanden (de Basic Transport File (<Project>.BTN) en het invoerbestand van de user-defined reactiemodule (<Project>.RCT) geldt echter dat een aantal invoerparameters bij voorbaat zijn gedefinieerd door de in ANIMO-RT3D gemodelleerde processen en de manier waarop deze processen zijn ingecodeerd. Deze mogen daarom niet aangepast worden in de invoerbestanden. Er is voor gekozen om deze “gefixeerde” invoerwaarden niet uit het invoerbestand te verwijderen en (in plaats daarvan) hard in te coderen in de broncode, om modelleers die reeds bekend zijn met RT3D met de hun vertrouwde opbouw van invoerbestanden te kunnen laten werken. Voor <Project>.BTN en <Project>.RCT geldt bovendien dat enkele aanpassingen zijn gemaakt in de opbouw van het bestand. Hieronder wordt per bestand aangegeven wat de gefixeerde variabelen zijn en wat de veranderingen in de invoer zijn t.o.v. de invoer van RT3D v2.5. De regelnummers die hierbij genoemd worden komen overeen met de in Zheng en Wang (1999) regelnummering.

RT3D Basic Transport (BTN) File

Gefixeerde variabelen:

NCOMP en MCOMP:

- NCOMP is het totaal aantal gemodelleerde stoffen (mobiel plus immobiel). In ANIMO-RT3D worden 6 mobiele species gemodelleerd: nitraat, ammonium, fosfaat, DOM, DON en DOP. Daarnaast worden plus 5 immobiele species gemodelleerd: humus/biomassa, geadsorbeerd ammonium, een evenwichtsfase voor geadsorbeerd fosfaat, een niet-evenwichtsfase voor geadsorbeerd fosfaat, en fosfaatprecipitaat. Dit brengt NCOMP op 11. Deze waarde mag niet aangepast worden;
- MCOMP is het aantal gemodelleerde mobiele stoffen. Zoals hierboven beschreven worden er in ANIMO-RT3D 6 mobiele species gemodelleerd. Dit brengt MCOMP op 6. Deze waarde mag niet aangepast worden.

Aanpassing 1:

CODE	REGEL	INVOER
RT3D v2.5	A3	NLAY,NROW,NCOL,NPER,NCOMP,MCOMP (format 6I10)
ANIMO-RT3D	A3	NLAY,NROW,NCOL,NPER,NCOMP,MCOMP,USRINP (format 7I10)

Opmerkingen:

- USRINP is een keuzeoptie voor invoer:
 - USRINP ≠ 1: Initiële concentraties, porositeiten, droge bulkdichtheden en ruimtelijk gedistribueerde reactieparameters worden opgegeven in <project>.BTN en <project>.RCT, zoals in RT3D v2.5;
 - USRINP = 1: Initiële concentraties, porositeiten, droge bulkdichtheden en ruimtelijk gedistribueerde reactieparameters worden ontleend uit ANIMO-invoer en door ANIMO geprojecteerd op het RT3D grid. Zij hoeven niet in de RT3D invoer opgenomen te worden.

Aanpassing 2:

CODE	REGEL	INVOER
RT3D v2.5	A11	PRSITY (NCOL,NROW) (één array voor elke laag) (format: RARRAY (zie Zheng and Wang, 1999))
ANIMO-RT3D	A11	Alleen als USRINP $\neq$ 1 PRSITY (NCOL,NROW) (één array voor elke laag) (format: RARRAY (zie Zheng and Wang, 1999))

Opmerkingen:

- PRSITY geeft per laag een array met de porositeit van de bodem. De verandering in ANIMO-RT3D t.o.v. RT3D v2.5 is dat deze arrays alleen ingevoerd dienen te worden indien USRINP $\neq$ 1. Als USRINP = 1 wordt deze parameter door ANIMO aangeleverd aan RT3D.

Aanpassing 3:

CODE	REGEL	INVOER
RT3D v2.5	A13	SCONC(1) SCONC(2) SCONC(3)... en zo verder... tot SCONC(NCOMP) (format: RARRAY (zie Zheng and Wang, 1999))
ANIMO-RT3D	A13	Alleen als USRINP $\neq$ 1 SCONC(1) SCONC(2) SCONC(3)... en zo verder... tot SCONC(NCOMP) (format: RARRAY (zie Zheng and Wang, 1999))

Opmerkingen:

- SCONC geeft per laag een array met de initiële concentraties van de betreffende stof. De verandering in ANIMO-RT3D t.o.v. RT3D v2.5 is dat deze arrays alleen ingevoerd dienen te worden indien USRINP $\neq$ 1. Als USRINP = 1 wordt deze parameter door ANIMO aangeleverd aan RT3D.

RT3D Reaction (RCT) File

Gefixeerde variabelen:

ISOTHM, IREACT, NCRXNDATA, NVRXNDATA, ISOLVER:

- ISOTHM geeft aan welke isotherm wordt gesimuleerd t.b.v. de sorptieprocessen (1 = lineair, 2 = Freundlich, 3 = Langmuir, 0 = geen isotherm). Omdat sorptie in het RT3D deel van ANIMO-RT3D expliciet als reactie wordt gemodelleerd en niet als retardatie, hoeft hier geen isotherm gekozen te worden. Dus: ISOTHM = 0.
- IREACT geeft het nummer van de gebruikte reactiemodule. ANIMO-RT3D maakt gebruik van de user-defined reaction module. Dit is module 10. Dus: IREACT = 10.
- NCRXNDATA is het aantal ruimtelijk constante reactieparameters. In de huidige versie bestaan 7 ruimtelijk constante reactieparameters:
RC(1) = denitrificatiesnelheidsconstante bij limiterende
nitraatconcentraties (d^{-1});

RC(2) = hoge reactiesnelheidsconstante voor het simuleren van evenwichtssorptie (d^{-1});
 RC(3) = assimilatie/dissimilatie ratio afbraak organische pools (-);
 RC(4) = afbraaksnelheidsconstante opgelost organische stof (d^{-1}); RC(5) = afbraaksnelheidsconstante humus/biomassa (d^{-1});
 RC(6) = stikstofgehalte humus/biomassa (kg/kg);
 RC(7) = fosforgehalte humus/biomassa (kg/kg).

Dus: NCRXNDATA = 7

- NVRXNDATA is het aantal ruimtelijk variabele reactieparameters. In de huidige versie bevinden zich 8 ruimtelijk variabele reactieparameters:

VRC(j,i,k,1) = lineaire partiticoëfficiënt for lineaire ammoniumsorptie (m^3kg^{-1});
 VRC(j,i,k,2) = Langmuirconstante voor fosfaatsorptie (m^3kg^{-1});
 VRC(j,i,k,3) = totale concentratie van beschikbare locaties voor Langmuir evenwichtssorptie fosfaat (kg/kg);
 VRC(j,i,k,4) = reactiesnelheidsconstante voor kinetische Freundlichsorptie (d^{-1});
 VRC(j,i,k,5) = reactiesnelheidsconstante voor kinetische Freundlichdesorptie (d^{-1});
 VRC(j,i,k,6) = Freundlichconstante voor fosfaatsorptie ($m^3kg^{-1}N$);
 VRC(j,i,k,7) = Freundlichexponent voor fosfaatsorptie (-);
 VRC(j,i,k,8) = Evenwichtsconcentratie fosfaat (kg/m^3).
 Dus: NCRXNDATA = 8.

- ISOLVER geeft de voor het oplossen van de reacties gebruikte solver aan. De impliciete solver is de enige optie die in RT3D v2.5 aanwezig is voor alle reactiemodules behalve modules 1 en 2. Daarom ISOLVER = 1.

Aanpassing 1:

CODE	REGEL	INVOER
RT3D v2.5	E2	RHOB(NLAY) (één waarde voor elke laag) (format: RARRAY (zie Zheng and Wang, 1999))
ANIMO-RT3D	E2	Alleen als USRINP $\neq$ 1 RHOB(NLAY) (één waarde voor elke laag) (format: RARRAY (zie Zheng and Wang, 1999))

Opmerkingen:

- RHOB is de droge bulkdichtheid van de bodem (kg/m^3). De verandering in ANIMO-RT3D t.o.v. RT3D v2.5 is dat deze parameter alleen ingevoerd dient te worden indien USRINP $\neq$ 1. Als USRINP = 1 wordt deze parameter door ANIMO aangeleverd aan RT3D.

5.3.2 Uitvoer

De uitvoer van RT3D in ANIMO-RT3D is ongewijzigd ten opzichte van RT3D v2.5.

6 Verificatie van de RT3D chemie

In Hoofdstuk 4 is beschreven hoe de C-, N- en P-kringlopen zoals die in ANIMO worden gemodelleerd naar het RT3D-domein zijn overgebracht, waarbij enkele vereenvoudigingen zijn toegepast die voor het verzadigde domein verdedigbaar worden geacht, maar die wel tot verschillen met bijv. STONE resultaten zouden kunnen leiden. Om discussies hierover te vermijden zal in een volgende versie de beschrijving nog meer 1:1 worden overgenomen. In Hoofdstuk 5 is vervolgens de technische implementatie van de ANIMO-chemie in RT3D belicht. Om te verifiëren of voor de ANIMO-RT3D koppeling ontworpen RT3D-reactiemodule correct is ontworpen en goed is ingeprogrammeerd, zijn vergelijkende berekeningen uitgevoerd waarbij de resultaten van een strikt 1-dimensionaal RT3D-model zijn vergeleken met een strikt 1D ANIMO model. De details van de uitgevoerde sommen worden hieronder verder toegelicht.

6.1 Het verificatiemodel

De modelvergelijking is uitgevoerd door een (stationaire) ANIMO-RT3D- simulatie uit te voeren waarbij ANIMO niet alleen het domein boven het grensvlak doorrekent, maar tevens het domein onder het grensvlak. De ANIMO-resultaten voor het domein onder het grensvlak kunnen, indien de discretisatie van dit domein in ANIMO gelijk is aan die in RT3D, direct vergeleken worden met de resultaten die door RT3D voor dit domein berekend worden.

6.1.1 Discretisatie

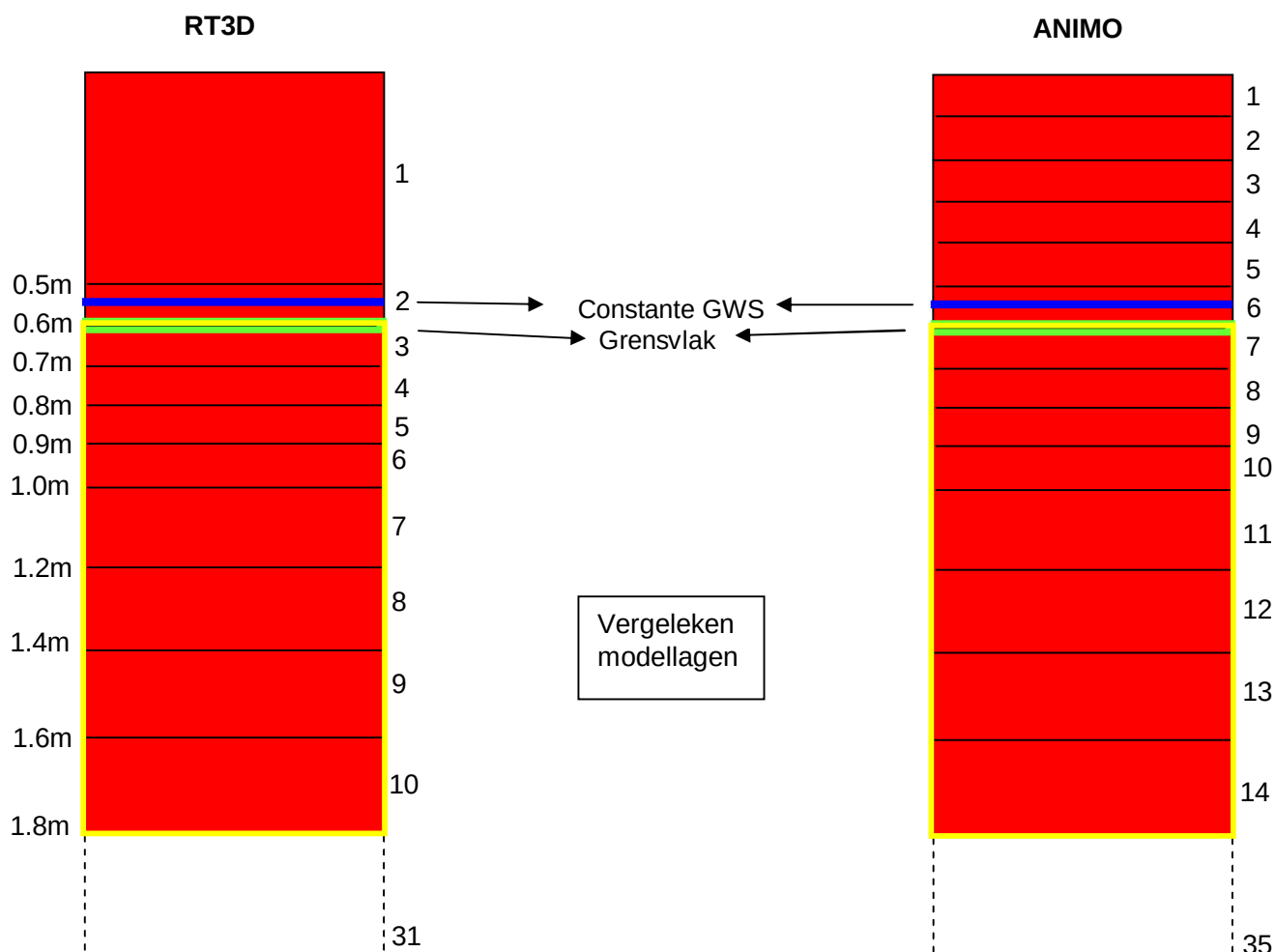
Het verificatiemodel bestaat uit 1 kolom, waarin middels een vaste bovenrandvoorwaarde (een aanvulling van 0.75 mm/dag) en een vaste onderrandvoorwaarde (een vaste stijghoogte van -3.57 meter) een stationair, strikt 1D stromingsveld is gegenereerd. De discretisatie van de modelkolom in ANIMO en in RT3D is weergegeven in Figuur 6.1. Hierin is ook de stationaire grondwaterstand ingetekend die het gevolg is van de opgelegde hydrologische randvoorwaarden. De stationaire grondwaterstand bedraagt 0.54 m-mv en bevindt zich in laag 6 van de ANIMO-kolom. In lijn met de in Hoofdstuk 2 beschreven implementatie van het grensvlak en de daarop aangepaste discretisatie van RT3D, bevindt het grensvlak zich onder ANIMO-laag 6, en corresponderen RT3D-laag 2 en 3 met respectievelijk ANIMO-laag 6 en 7 (het grensvlakstelsel).

Onder het grensvlak is de discretisatie van beide modellen identiek zodat de modelresultaten eenvoudig vergeleken kunnen worden. De ANIMO kolom bestaat in totaal uit 35 lagen. Doordat RT3D per definitie slechts twee lagen boven het grensvlak heeft (waar ANIMO er 6 heeft), bestaat de RT3D kolom uit 31 lagen. Indien de ANIMO-chemie correct in RT3D is geïmplementeerd, moeten beide modellen onder het grensvlak vergelijkbare resultaten geven

6.1.2 Invoer

ANIMO

De invoer is op onderstaande punten na identiek aan de invoer van het voorbeeld "Cranendonck Grass" uit Renaud et al. (2006) (p. 79-92). Dit voorbeeld berekent N- en P-uitspoeling op een begraasd zandig graslandperceel dat onderdeel uitmaakte van veldexperiment bestaande uit 6 percelen met verschillende mestgift.



Figuur 6.1. Discretisatie van het 1D RT3D- en het 1D ANIMO-model dat gebruikt is voor de verificatieberekeningen, waarbij de geel omrande vakken de lagen aangeven waarvan de resultaten zijn vergeleken tussen de twee modellen.

Omdat in RT3D geen vers organisch materiaal wordt gemodelleerd zijn de initiële concentraties van vers organisch materiaal op nul gezet voor de lagen onder het grensvlak (in invoerbestand Initial.INP). Voor de overige Enkele aanpassingen waren nodig om ervoor te zorgen dat in ANIMO dezelfde (en niet méér) processen werden gemodelleerd als in RT3D, om een eerlijke vergelijking mogelijk te maken. De gedane aanpassingen zijn:

- organische pools die in ANIMO wel en in RT3D niet worden gemodelleerd waren de initiële concentraties in deze lagen al 0 in het originele “Cranendonck Grass” voorbeeld;
- Omdat in RT3D slechts 1 kinetische sorptiesite voor fosfaat wordt gemodelleerd, en in het originele “Cranendonck Grass” voorbeeld 3, is dit aantal in de ANIMO-invoer teruggebracht (in invoerbestand CHEMPAR.INP)

RT3D

Om een eerlijke vergelijking mogelijk te maken tussen de RT3D-modellering van de transportprocessen en de ANIMO-modellering ervan, moet de RT3D invoer zo exact mogelijk de ANIMO-invoer volgen. Dit is als volgt bereikt:

- Voor startconcentraties, fysische bodemparameters (porositeiten en droge bulkdichtheden) en ruimtelijk gedistribueerde reactieparameters: door USRINP op 1 (zie Hoofdstuk 5) te zetten in het RT3D invoerbestand <Project>.BTN zijn al deze variabelen overgenomen uit de ANIMO-invoer en geprojecteerd op het RT3D grid.
- Voor ruimtelijk constante reactieparameters: deze zijn onderdeel van het RT3D-invoerbestand <Project>.RCT (zie Hoofdstuk 5). Hun waarden zijn handmatig overgenomen uit de ANIMO-invoer.
- Voor dispersiecoëfficiënten: in ANIMO wordt de gewenste dispersie gesimuleerd door een geschikte keuze van de diktes van de modellagen. Met andere woorden: numerieke dispersie wordt gebruikt voor de simulatie van hydrodynamische dispersie. In RT3D, waarin allerlei slimme oplossingstechnieken zijn geïmplementeerd om de numerieke dispersie juist zoveel mogelijk in te dammen, dient de gewenste dispersie expliciet opgegeven te worden in invoerbestand <Project>.DSP door middel van dispersiecoëfficiënten. Groenendijk et al. (2005) geven een uitdrukking voor de relatie tussen de diktes van de modellagen en de resulterende numerieke dispersie:

$$D_n = \frac{(\Delta z)^2}{t_{res}} \left(\frac{\frac{\Delta t}{t_{res}}}{1 - e^{-\frac{\Delta t}{t_{res}}}} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Delta t}{t_{res}} \right) \right) ; \quad t_{res} = \frac{\theta \Delta z}{q} \quad (6.1)$$

waarbij

t_{res}	=	verblijftijd van bodemvocht in de modellaag (d);
q	=	waterflux (m/d);
D_n	=	numerieke dispersiecoëfficiënt (m ² /d);
z	=	dikte van de modellaag (m);
Δt	=	lengte van de transportstap (d);
θ	=	vochtgehalte (-).

Verg. (6.1) is gebruikt om per ANIMO-modellaag te berekenen hoe groot de als hydrodynamische dispersie gebruikte numerieke dispersie is tijdens de ANIMO-simulatie. De aldus berekende dispersiecoëfficiënten zijn vervolgens voor de RT3D-lagen onder het grensvlak overgenomen in het invoerbestand <Project>.DSP.

6.1.3 Timing

Voor de verificatieberekening heeft ANIMO gerekend met transportstappen van 1 dag. In RT3D werden deze transportstappen vanwege de dispersie onderverdeeld in transportstappen van 0.024 dag. In totaal werd een periode van 1096 dagen (3 jaar, 1990-1992) doorgerekend.

6.2 Resultaten

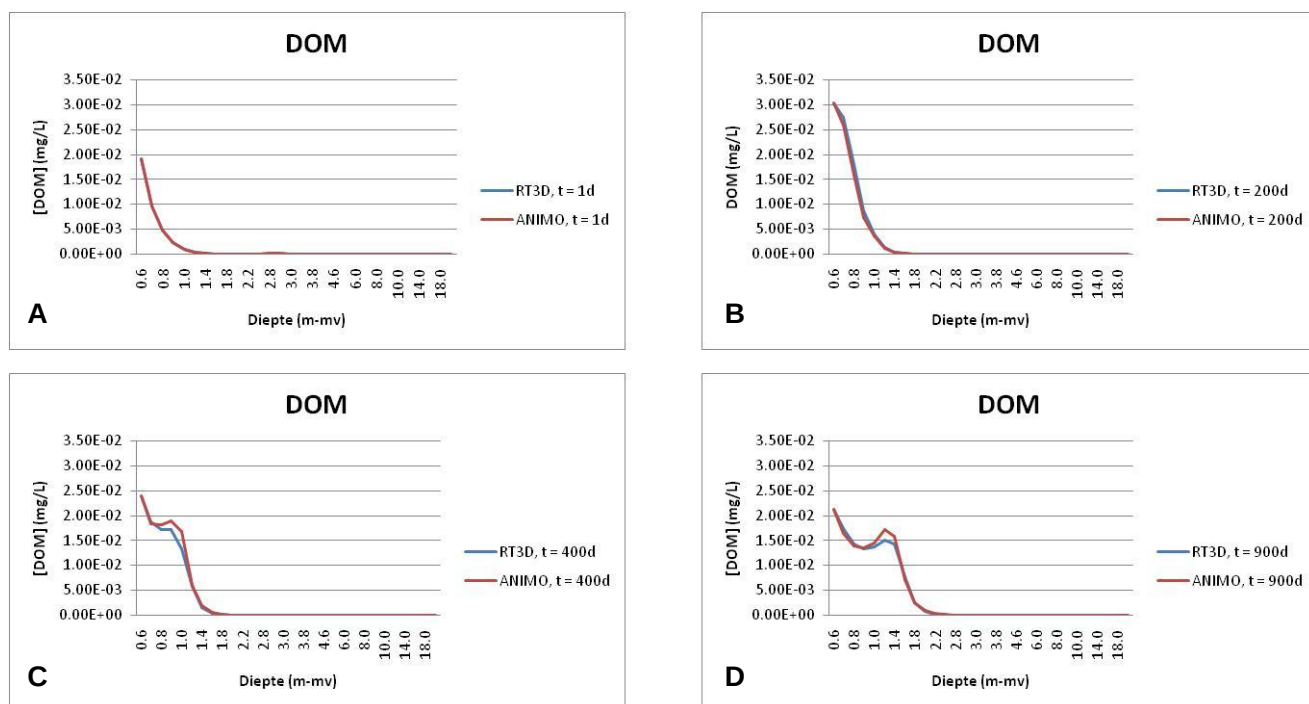
Figuren 6.2 t/m 6.9 laten voor 8 van de 11 in RT3D gemodelleerde stoffen (respectievelijk DOM, nitraat, ammonium, geadsorbeerd ammonium, fosfaat, geadsorbeerd fosfaat in evenwichtsfase, geadsorbeerd fosfaat in niet-evenwichtsfase en humus/biomassa) de resultaten zien van de uitgevoerde vergelijking. Fosfaatprecipitatie is nog niet geverifieerd

omdat fosfaatprecipitatie niet optrad in het doorgerekende voorbeeld. DON en DOP lieten in het doorgerekende voorbeeld hetzelfde patroon zien als DOM en worden daarom niet getoond.

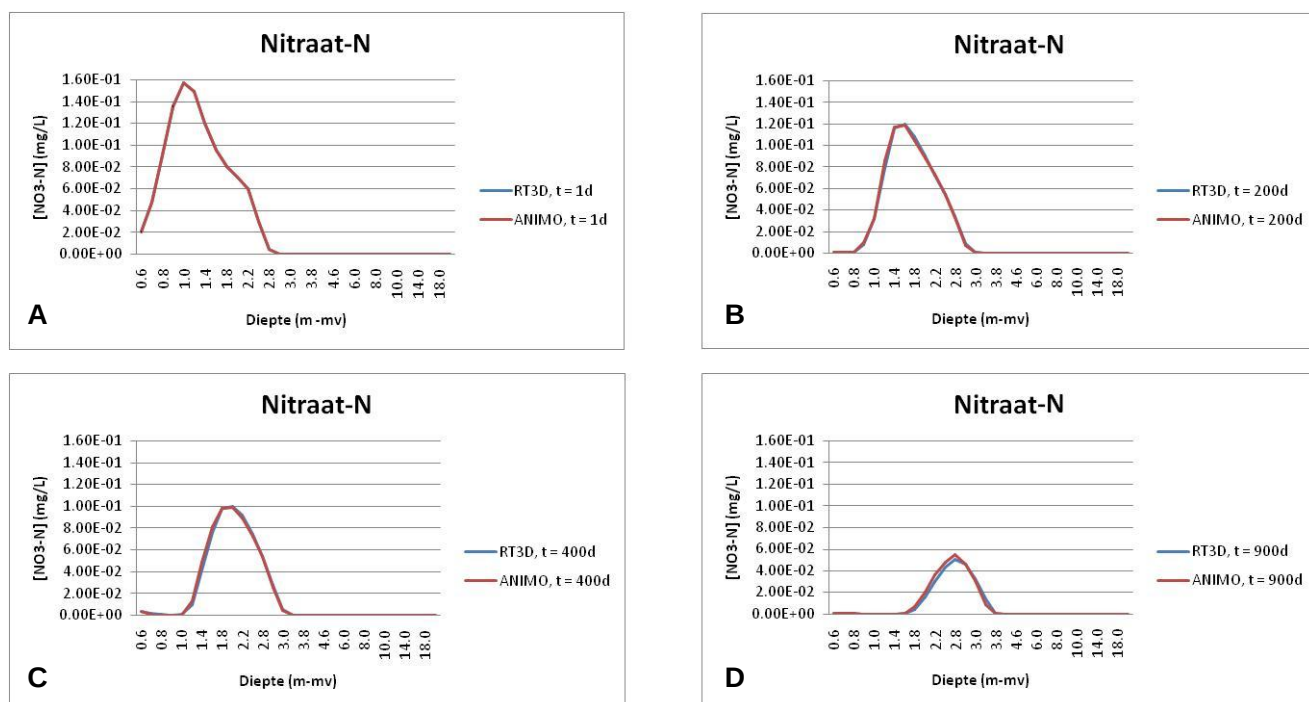
De figuren geven per stof het concentratieprofiel vanaf het grensvlak op vier tijdstippen: $t = 1d$, $t = 200d$, $t = 400d$ en $t = 900d$. Voor alle stoffen geldt dat er een goede match is tussen de resultaten verkregen met RT3D en de resultaten verkregen met ANIMO. Met inachtneming van de in de volgende sectie besproken beperkingen, kan daarom gesteld worden dat RT3D in ieder geval het merendeel van de in het permanent verzadigde deel van het domein relevante ANIMO-processen adequaat simuleert. Behalve een controle op de in RT3D geïmplementeerde chemie leveren de resultaten bovendien vertrouwen op in de organisatie van de algemene datastroom in ANIMO-RT3D en de communicatie tussen ANIMO en RT3D.

6.3 Beperkingen van de verificatie en aanbevelingen

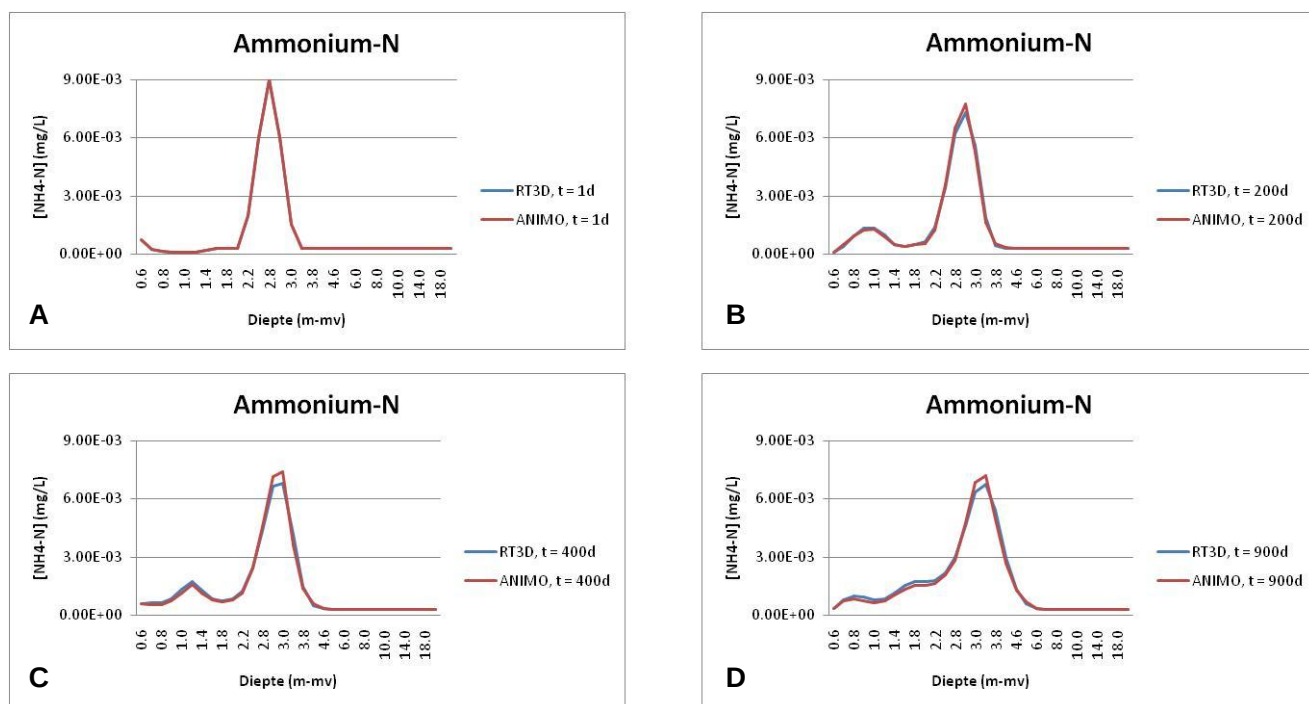
De verificatie van de RT3D-chemie is tot op heden slechts uitgevoerd op basis van één voorbeeldsom ("Cranendonck Grass") en bovendien voor een korte simulatieperiode (3 jaar). Niet alle ingeprogrammeerde mechanismen treden in dit voorbeeld in werking (in ieder geval ammonium- en fosfaattekort voor immobilisatie, zie Hoofdstuk 4, en fosfaatprecipitatie). De verificatie is daarom nog onvolledig. Voorzien wordt dat de verificatie voor volgende modelversies wordt uitgebreid. Tot die tijd is voorzichtigheid geboden en wordt aanbevolen om ofwel de verificatie zelf uit te breiden (m.n. voor langere periode en voor bovengenoemde processen), ofwel de hierboven uitgelegde 1D-verificatie regelmatig te herhalen voor een slimme selectie van kolommen uit het modelgebied, zeker wanneer bovengenoemde processen verwacht worden.



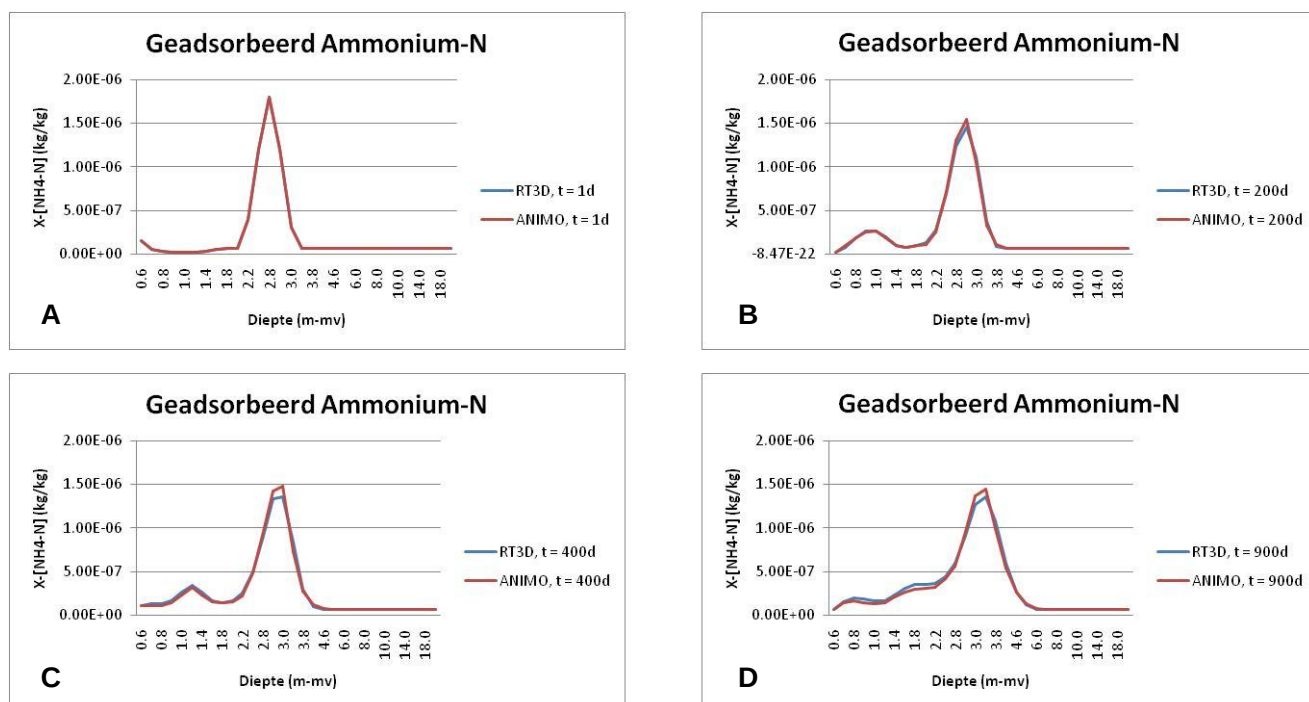
Figuur 6.2. Ontwikkeling van het DOM-profiel gedurende de simulatie.



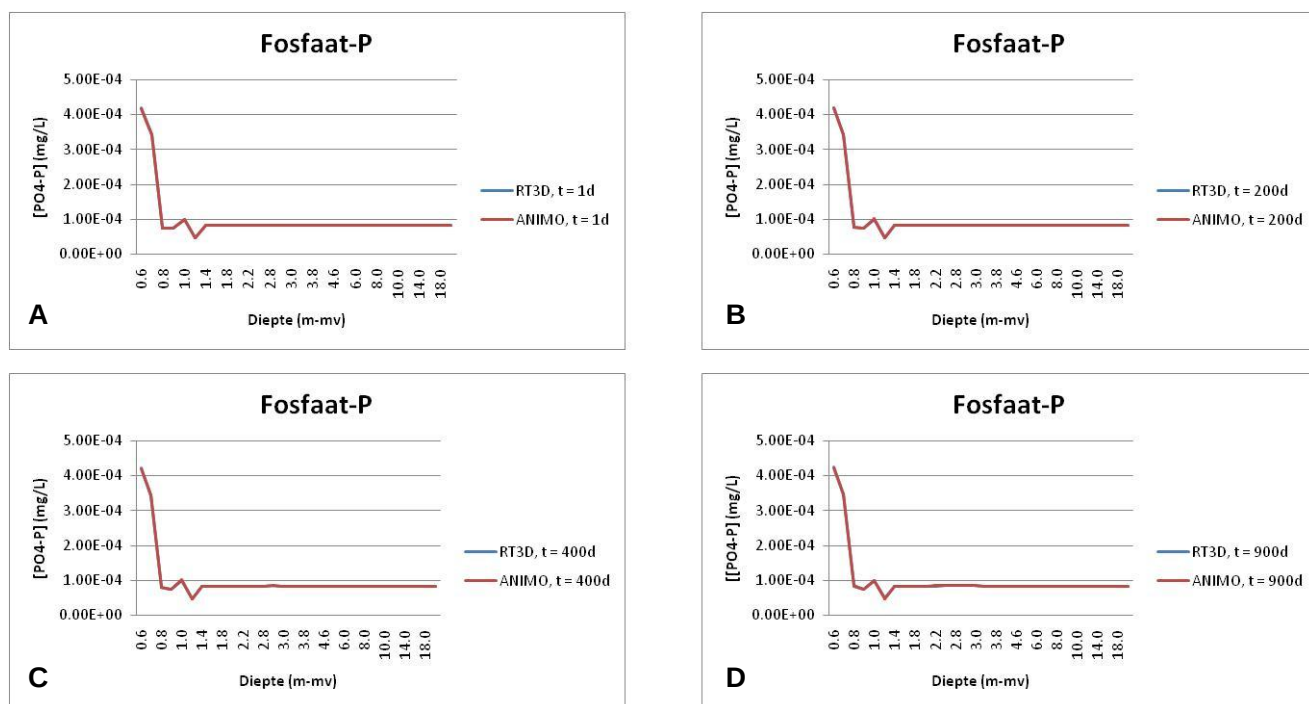
Figuur 6.3. Ontwikkeling van het nitraatprofiel gedurende de simulatie.



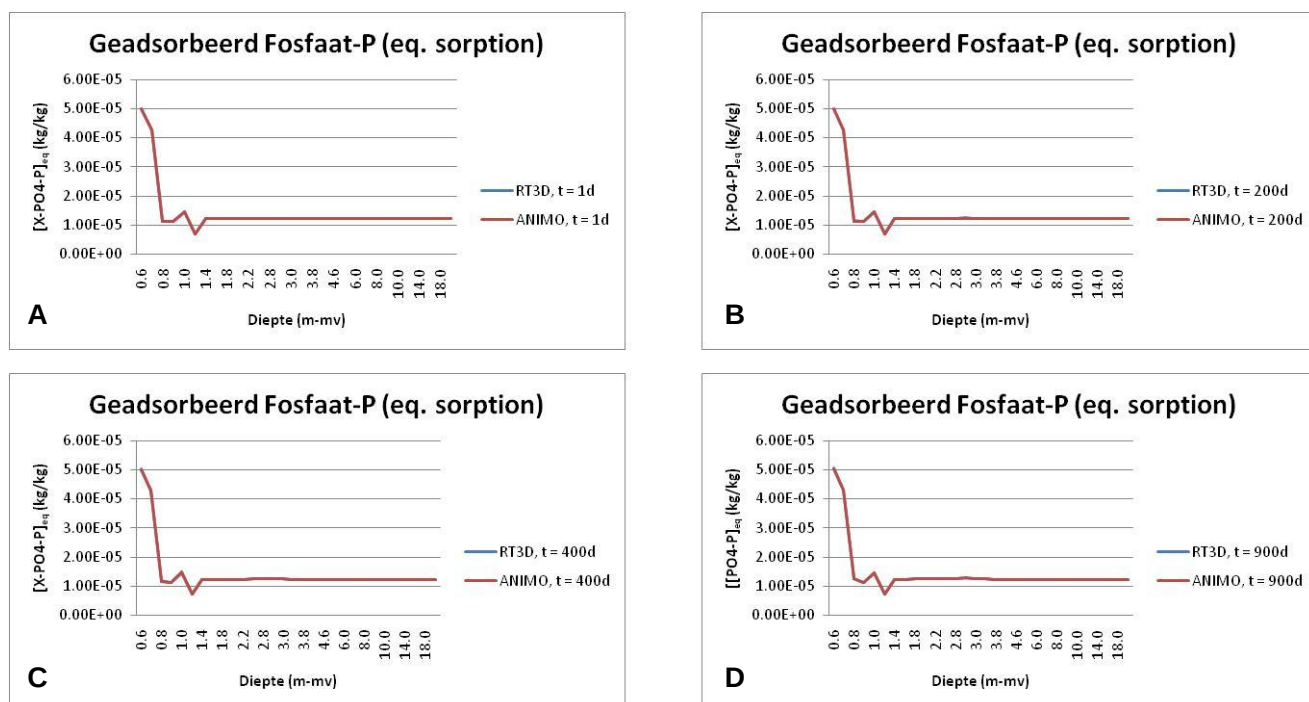
Figuur 6.4. Ontwikkeling van het ammoniumprofiel gedurende de simulatie.



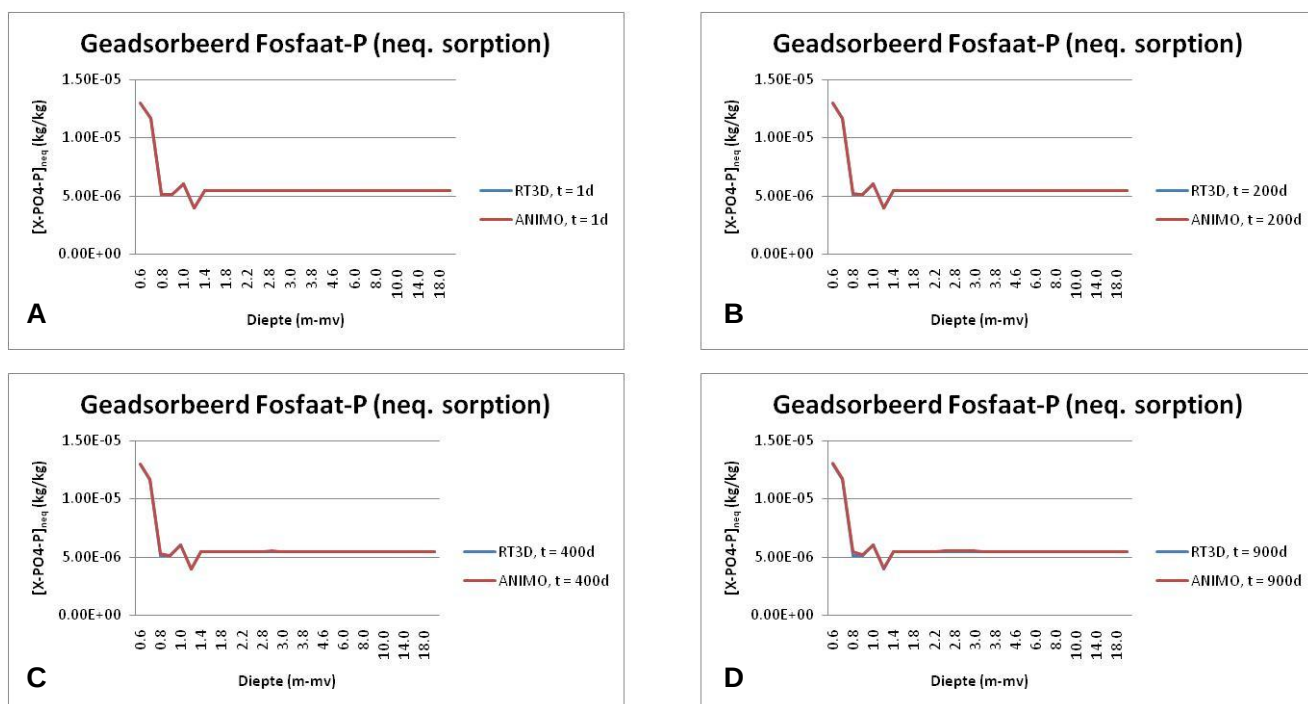
Figuur 6.5. Ontwikkeling van het geadsorb.-ammoniumprofiel gedurende de simulatie.



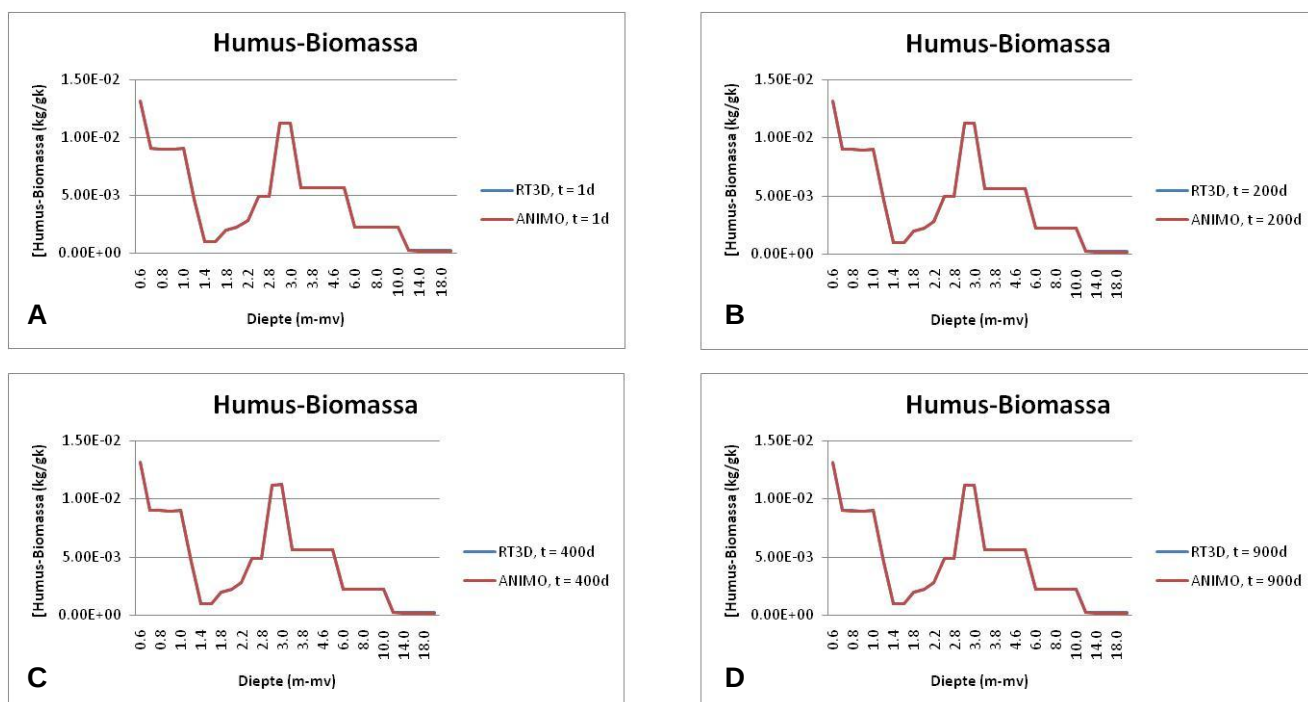
Figuur 6.6. Ontwikkeling van het fosfaatprofiel gedurende de simulatie.



Figuur 6.7. Ontwikkeling van het geadsorbeerd-fosfaatprofiel (evenwichtssorptie).



Figuur 6.8. Ontwikkeling van het geadsorbeerd-fosfaatprofiel (kinetische sorptie).



Figuur 6.9. Ontwikkeling van het humus-biomassa-profiel gedurende de simulatie.

7 Rekenvoorbeeld

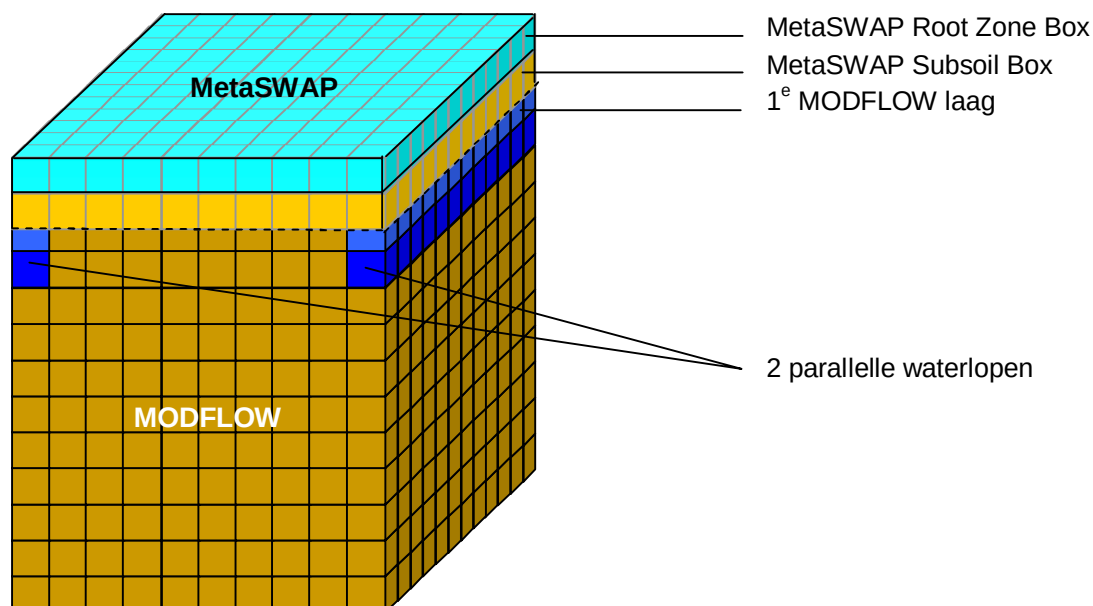
In dit hoofdstuk wordt, ter illustratie van de mogelijkheden van en het werken met ANIMO-RT3D, een instationaire simulatie uitgevoerd met een 3D-testmodel.

7.1 Invoer van het testmodel

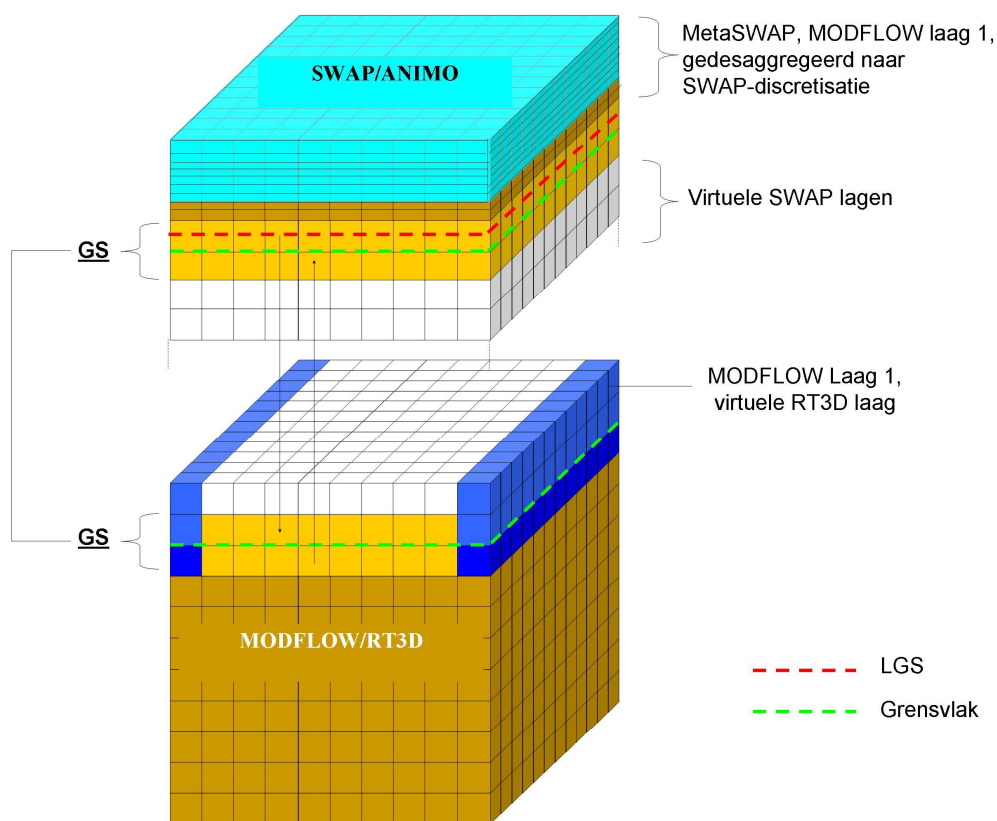
7.1.1 Algemene omschrijving van het MODMSW-model

Het MODMSW-model waarmee de Prerun (zie sectie 2.2.1) is uitgevoerd ter bepaling van de positie van het Grensvlak bestaat uit 11 lagen, 12 rijen en 10 kolommen (zie Figuur 7.1). De gridcellen hebben een dimensie van 25x25 meter. De ondergrondschematisatie is ontleend uit een geselecteerd gebied van het MIPWA-model (Snepvangers et al., 2007, de zuidwesthoek van het gebied heeft de coördinaten (165375, 584525) in het RD stelsel). Alle invoer voor MetaSWAP is voor het betreffende gebied uit de MetaSWAP-databases onttrokken. Zo ook de dagelijkse reeksen van neerslag en verdamping.

De zij- en onderranden van het model zijn alle dicht (no flow boundaries). In het model bevinden zich 2 waterlopen zoals aangegeven in Figuur 7.1. Deze waterlopen hebben een constant peil. De bodems van de waterlopen bevinden zich ter hoogte van MODFLOW laag 2. Omdat ook de bovenliggende laag interactie moet kunnen hebben met de waterlopen is, naar de methodiek vermeld in bijlage E van Snepvangers en Minnema (2007), de weerstand van deze waterlopen verdeeld over MODFLOW laag 1 en 2. De waterlopen zijn dus toegekend aan zowel MODFLOW laag 1 als 2.



Figuur 7.1. Schematische weergave van het MODMSW model (laagdiktes niet op schaal). Het MetaSWAP-model, bestaande uit 2 Boxen, communiceert met MODFLOW-laag 1.



Figuur 7.2. Schematische weergave van de opsplitsing van het profiel in een MODFLOW/RT3D en een SWAP/ANIMO domein, en de implementatie van het Grensvlak (laagdiktes niet op schaal). De waterlopen worden ondergebracht in het MODFLOW domein (zie bulktekst). GS = Grensvlaksysteem.

Met het MODMSW-model is een periode van 3 jaar doorgerekend (1990-1992). Dit geldt ook voor de uiteindelijke run met ANIMO-RT3D.

7.1.2 Herdiscretisatie en bepaling van het grensvlak

Conform stappen 2 t/m 4 in Hoofdstuk 2 is een verfijning van de verticale discretisatie van het MODMSW-model gekozen (de "SWAP-discretisatie, zie Figuur 7.2, de laagdiktes zijn hetzelfde gekozen als in Hoofdstuk 6, zie Figuur 6.1) en is de laagst gesimuleerde grondwaterstand gebruikt ter bepaling van de positie van het Grensvlak. Voor alle kolommen geldt dat de laagst gesimuleerde grondwaterstand (LGS) zich in SWAP-laag 11 bevindt (zie Figuur 7.2). Het grensvlaksysteem bestaat dus uit SWAP-lagen 11 en 12, welke een counterpart krijgen in MODFLOW/RT3D. Het relevante SWAP/ANIMO domein (zonder virtuele lagen, dus alleen het grensvlaksysteem en het domein daarboven) bestaat uit 12 SWAP-lagen.

Het domein onder het grensvlak is onderverdeeld in 10 MODFLOW/RT3D lagen. Samen met de 2 MODFLOW/RT3D lagen boven het grensvlak heeft het definitieve MODMSW-model waarmee hydrologische invoer voor ANIMO-RT3D wordt gegenereerd een totaal aantal van 12 MODFLOW-lagen. Tegelijkertijd betekent dit dat het RT3D-submodel van ANIMO-RT3D 12 lagen kent, waarvan 1 virtueel.

Omdat de bodems van de waterlopen zich onder het bepaalde Grensvlak bevinden, in MODFLOW laag 3, wordt de weerstand van deze waterlopen in het definitieve MODMSW-model verdeeld over MODFLOW lagen 1 t/m 3. Dit betekent dat de waterlopen zich deels boven en deels onder het grensvlak bevinden. Een deel van de uitspoeling richting het oppervlaktewater zal dus gemodelleerd worden door SWAP/ANIMO, middels de desaggregatie van de MODFLOW-fluxen richting de waterlopen naar het quasi-2D concept. Het overige deel wordt gemodelleerd door MODFLOW. Bij het berekenen van de totale uitspoeling moeten beide delen bij elkaar opgeteld worden. Dit zal bij de presentatie van de resultaten worden geïllustreerd.

7.1.3 Invoer RT3D en ANIMO

ANIMO

Zoals is Hoofdstuk 5 is vermeld kan de invoer van ANIMO onderverdeeld worden in drie delen: het bestand Animo.ini (bevat slechts verwijzingen naar bestandsnamen), de kolomspecifieke invoer en het bestand Outdist.Inp. De kolomspecifieke invoer is voor alle 120 kolommen van het testmodel hetzelfde en ontleend aan het "Cranendonck Grass" voorbeeld uit Renaud et al. (2006), met de in Hoofdstuk 6 vermelde aanpassingen.

Het testmodel is doorerekend met de in Figuur 7.3 (het gebruikte Outdist.Inp) vermelde keuzes voor gedistribueerde uitvoer van het ANIMO-domein. Voor uitleg van dit bestand wordt terugverwezen naar Hoofdstuk 6. In Figuur 7.3 is af te lezen dat om tijdsreeksen (Outopt(3) = 1) wordt gevraagd met dagelijkse waarden van de uitspoeling (fluxen, vrachten, fluxgewogen concentraties) richting de waterlopen (Outbound(4) = 1) voor de stoffen nitraat (Outsel(1)=1), ammonium (Outsel(2)=1) en fosfaat (Outsel(3)=1).

RT3D

Door in <Project>.BTN USRINP op 1 te zetten (zie Hoofdstuk 5) is ervoor gekozen de initiële concentraties, de porositeiten, de droge-bulkdichtheden en de ruimtelijk gedistribueerde reactieparameters door ANIMO te laten projecteren op het RT3D grid. Deze variabelen zijn dus afkomstig uit de ANIMO-invoer van het "Cranendonck Grass"-voorbeeld. De ruimtelijk constante reactieparameters zijn onderdeel van het RT3D-invoerbestand <Project>.RCT, welke ter illustratie is gegeven in Figuur 7.4. De waarden van deze reactieparameters zijn handmatig overgenomen uit de ANIMO-invoer.

7.2 Resultaten

Figuren 7.5 t/m 7.7. laten de in Outdist.Inp opgevraagde uitvoer van het testmodel zien: de berekende waterafvoer naar de waterlopen, samen met de vracht en fluxgewogen concentraties van nitraat-N (Fig. 7.5), ammonium-N (Fig. 7.6) en fosfaat-P (Fig. 7.7). Met fluxgewogen wordt hier bedoeld dat van elke cel/kolom met een waterloop de bijdrage aan de (over het gehele modelsysteem gemiddelde) uitspoelingsconcentratie is gewogen aan de afvoer richting waterloop in die cel. De afvoeren, vrachten en concentraties zijn in elke figuur opgesplitst in een ANIMO-bijdrage en een RT3D-bijdrage, oftewel de door ANIMO berekende bijdragen aan deze termen vanuit de lagen boven het grensvlak en de door RT3D berekende bijdrage aan deze termen vanuit MODFLOW/RT3D laag 3 (onder het grensvlak). Tevens is de som van beide bijdragen gegeven, welke dus respectievelijk de totale waterafvoer, de totale vracht en de over beide bijdragen naar waterflux gewogen concentraties weergeeft. Hieronder worden respectievelijk de waterafvoer, de nitraatvracht en -concentraties, de ammoniumvracht en -concentraties, en de fosfaatvracht en -concentraties besproken

1096		!Ndist	
1990 1		!OutdistYr(I),OutdistSt(I)	(repeat Ndist
times)			
1990 2			
:			
:			
1992 364			
1992 365			
1 1 1 0 0 0 0 0		!Outspec(9)	
0 0 0 1 0		!Outbound(5)	
0 0 1		!Outopt(3)	
1		!Nkolomout	

Figuur 7.3. Het ANIMO-invoerbestand **Outdist.Inp**, zoals gebruikt in de voorbeeldberekening

Waterafvoer

Uit de figuur voor de waterafvoer (welke ter vergelijking met de vrachten en de concentraties in alle figuren wordt herhaald) blijkt dat de waterlopen van het voorbeeldmodel overwegend draineren (negatieve afvoer), maar dat er ook korte perioden zijn waarin infiltratie plaatsvindt. Verder blijkt dat de bijdrage aan de waterafvoer van en naar het domein onder het grensvlak (het RT3D domein) steeds groter is dan de bijdrage van en naar het domein boven het grensvlak (het ANIMO-domein).

Nitraat

Alvorens in te gaan op de resultaten voor nitraat is het interessant hier te melden dat, omdat de modelkolommen van het voorbeeldmodel op exact dezelfde wijze zijn geparameteriseerd als in de 1D sommen van Hoofdstuk 6 (alleen de waterstroming is anders), de stofprofielen van Figuur 6.2 t/m 6.9 te gebruiken zijn om de resultaten voor de vrachten en concentraties in het voorbeeldmodel te verklaren, aangezien deze informatie geven over het gedrag van de stoffen onder de in het voorbeeldmodel heersende omstandigheden. De vergelijking wordt nog vergemakkelijkt doordat, zoals gezegd, de "SWAP-discretisatie" in het testmodel gelijk is aan de discretisatie van het in Hoofdstuk 6 gebruikte 1D-model.

Figuur 7.5c laat zien dat de nitraatvracht richting het oppervlaktewater logischerwijs op dezelfde momenten piekt als de waterafvoer (bij drainage). Opvallend is de sterke afname van de vracht in de tijd. Dit hangt direct samen met de in de tijd afnemende fluxgewogen concentraties (Fig. 7.5b). Voor de bijdrage vanuit ANIMO is dit een gecombineerd effect van denitrificatie en uitspoeling naar het RT3D domein. Uit Figuur 6.3 blijkt dat het nitraat in de loop van de simulatie al snel volledig naar onder het grensvlak (welke zich onder SWAP-laag 11 en dus op een diepte van 1.2 meter bevindt, zie Figuur 6.1) uitspoelt. Bovendien is in Figuur 6.3 getoond dat er een significante afname van nitraat door denitrificatie plaatsvindt. Ook in de instationaire som van het voorbeeldmodel is te verwachten dat deze snelle uitspoeling en denitrificatie optreden. Dit is de reden dat de nitraatvracht vanuit het ANIMO-domein halverwege de simulatie al tot vrijwel nihil is gereduceerd.

Voor de bijdrage vanuit het RT3D-domein is de afname in de fluxgewogen concentratie het gecombineerde effect van denitrificatie en uitspoeling naar het oppervlaktewater. Het vanuit het ANIMO-domein naar het RT3D-domein uitgespoelde nitraat reist via langere stroombanen

0	10	7	8	1	2	!!SOTHM,IReact,ncrxndata,nvrndata,isolvr,irctop
1.0E-9	1.0E-9					!Atol, Rtol (one array for each component)
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
1.0E-9	1.0E-9					
0.06						!First order denitrification rate (d ⁻¹)
10.						!large reaction rate parameter (d ⁻¹) for equilibrium
sorption						
0.25						!Assimilation/Dissimilation ratio for DOM decay (-)
0.082						!First order DOM decay rate (d ⁻¹)
5.4795E-05						!Decomposition rate constant for humus/biomass (d ⁻¹)
0.04833333						!Nitrogen content of humus/biomass (kg/kg)
0.00604166						!Phosphorus content of humus/biomass (kg/kg)

Figuur 7.4. Het RT3D-invoerbestand <Project>.RCT, zoals gebruikt in de voorbeeldberekening

via een 3D-patroon naar het oppervlaktewater. De nitraatvracht vanuit het RT3D-domein is daarom aan het eind van de simulatie veel groter dan de vracht vanuit het ANIMO-domein.

Ammonium

Wat direct opvalt aan de figuur van de fluxgewogen ammoniumconcentraties (Figuur 7.6b) is dat bij voortdurende drainage de concentraties in het RT3D-domein veel hogere waarden bereiken dan de concentraties in het ANIMO-domein. De oorzaak hiervan kan gevonden worden in Figuur 6.4. Hierin is te zien dat het ammoniumprofiel initieel een piek vertoont tussen 2 en 3m –mv, met daarboven en daaronder veel lagere concentraties. Aangezien de hydrologische situatie overwegend (in ruimte in tijd) zo is dat infiltratie over het grensvlak plaatsvindt, is deze ammoniumpiek met name bepalend voor de kwaliteit van het onder het grensvlak uittredende grondwater. In eerste instantie (bij het begin van een drainageperiode) komt deze invloed nog niet tot uiting doordat de piek enkele modellagen en dus een bepaalde reistijd verwijderd is van de waterlopen. Na een langere periode van drainage bereiken stroombanen die de ammoniumpiek hebben doorkruist de waterlopen en neemt de ammoniumvracht vanuit het RT3D-domein sterk toe.

De lagere fluxgewogen concentraties van het uittredende grondwater in het ANIMO-domein, in combinatie met de kleinere waterafvoeren vanuit dit domein, hebben automatisch tot gevolg dat de ammoniumvrachten uit het ANIMO-domein ook op een veel lager niveau liggen dan vanuit het RT3D-domein (zie Figuur 7.6c)

Fosfaat

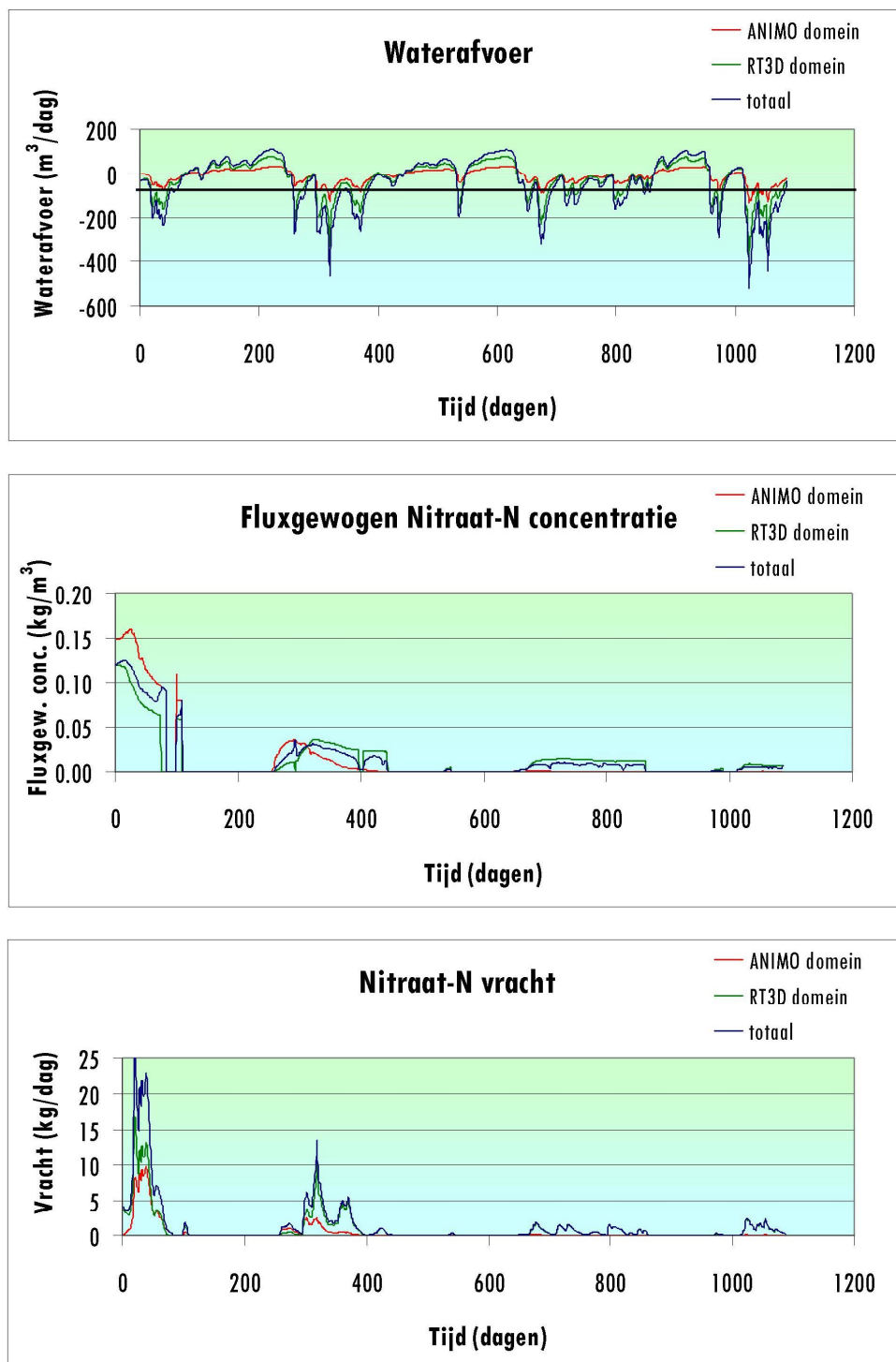
De figuur van de fluxgewogen gemiddelde fosfaatconcentraties (Figuur 7.7b) laat een hoekig en afgevlakt patroon zien voor de uitspoelingsconcentratie uit het RT3D-domein. Dit is een direct gevolg van het feit dat de fosfaatconcentratie onder het grensvlak (gelegen op 1.2m – mv) zowel in ruimte (diepte) als in de tijd constant is, zoals in Figuur 6.6 is af te lezen. Het stabiele concentratieprofiel van fosfaat geeft aan dat de fosfaatconcentraties sterk gebufferd

worden door de geadsorbeerde hoeveelheden fosfaat. Dit heeft tot gevolg dat, ondanks dat in een periode van infiltratie van de waterlopen schoon water infiltreert, dit geen effect heeft op de kwaliteit van het grondwater rondom de waterlopen. Zodra er weer drainage plaatsvindt is de fluxgewogen concentratie daarom vrijwel direct weer op peil. Dit verklaart de scherpe overgangen in concentratieniveaus bij de afwisseling van een situatie met infiltrerende waterlopen door een situatie met drainerende waterlopen, wat in contrast staat met wat bij ammonium is waargenomen.

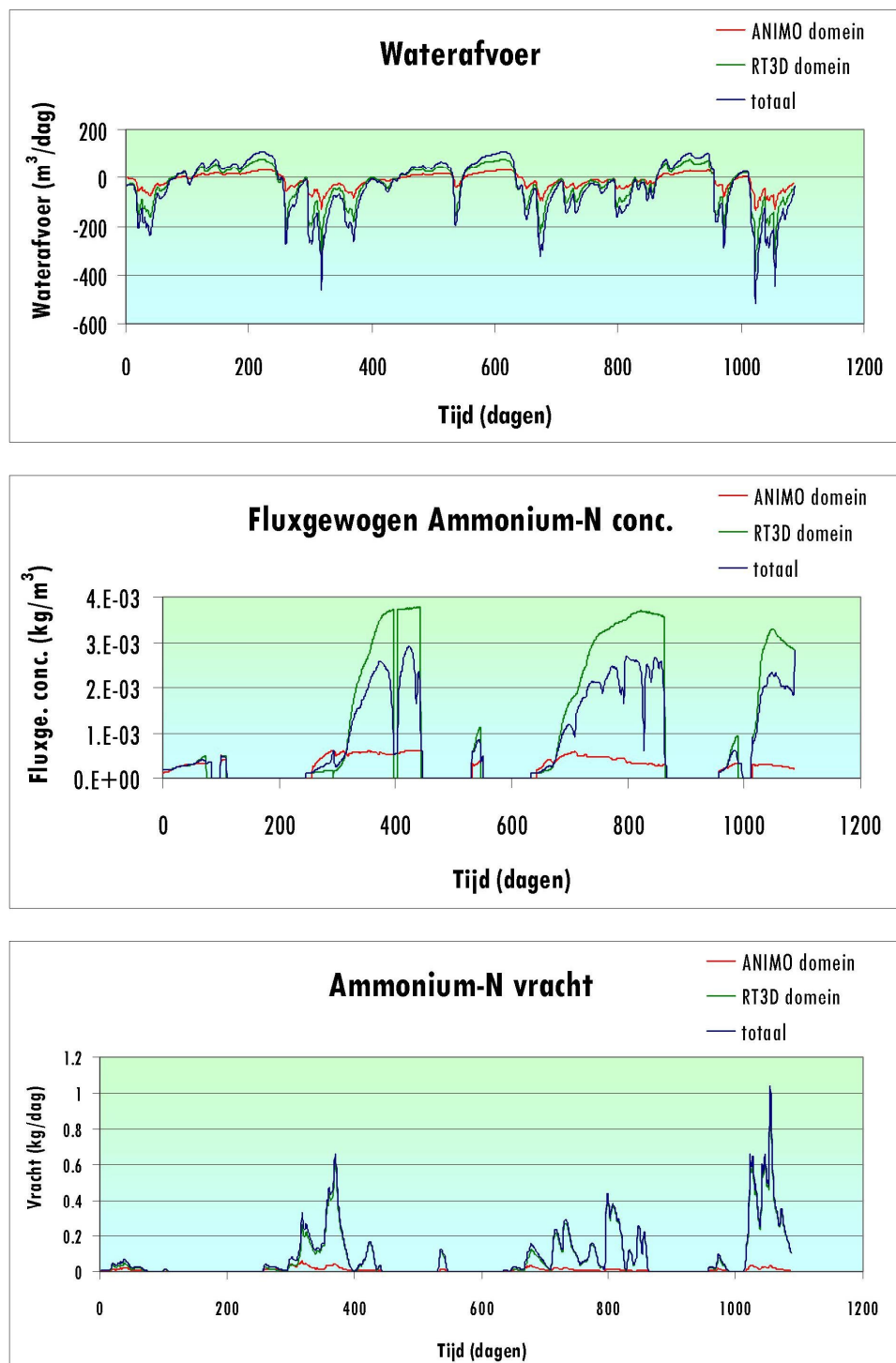
In tegenstelling tot de fluxgewogen fosfaatconcentraties van vanuit het RT3D-domein uittredend grondwater, vertonen de fluxgewogen fosfaatconcentraties van het ANIMO-domein wel schommelingen. Dit is een direct gevolg van het feit dat in dit domein de fosfaatconcentraties en -gehalten wel een verloop vertonen met de diepte, zoals te zien in Figuur 6.6. Bij variërende grondwaterstanden staat het grondwater in contact met een variërend traject van dit verloop, wat resulteert in variërende concentraties.

De fluxgewogen fosfaatconcentraties in het ANIMO-domein liggen vrijwel continu op een lager niveau dan de concentraties in het RT3D-domein. Men zou wellicht anders verwachten, gezien de sterkere verontreiniging met fosfaat bovenin het profiel (zie Figuur 6.6). Echter, in het voorbeeldmodel bevindt de grondwaterstand in de kolommen met de waterlopen zich steeds tussen 0.8 en 1.2m-mv. In dit traject vertoont het fosfaatprofiel juist een dip ten opzichte van het diepere deel van het traject. Vandaar de lagere fluxgewogen fosfaatconcentraties in het ANIMO-domein.

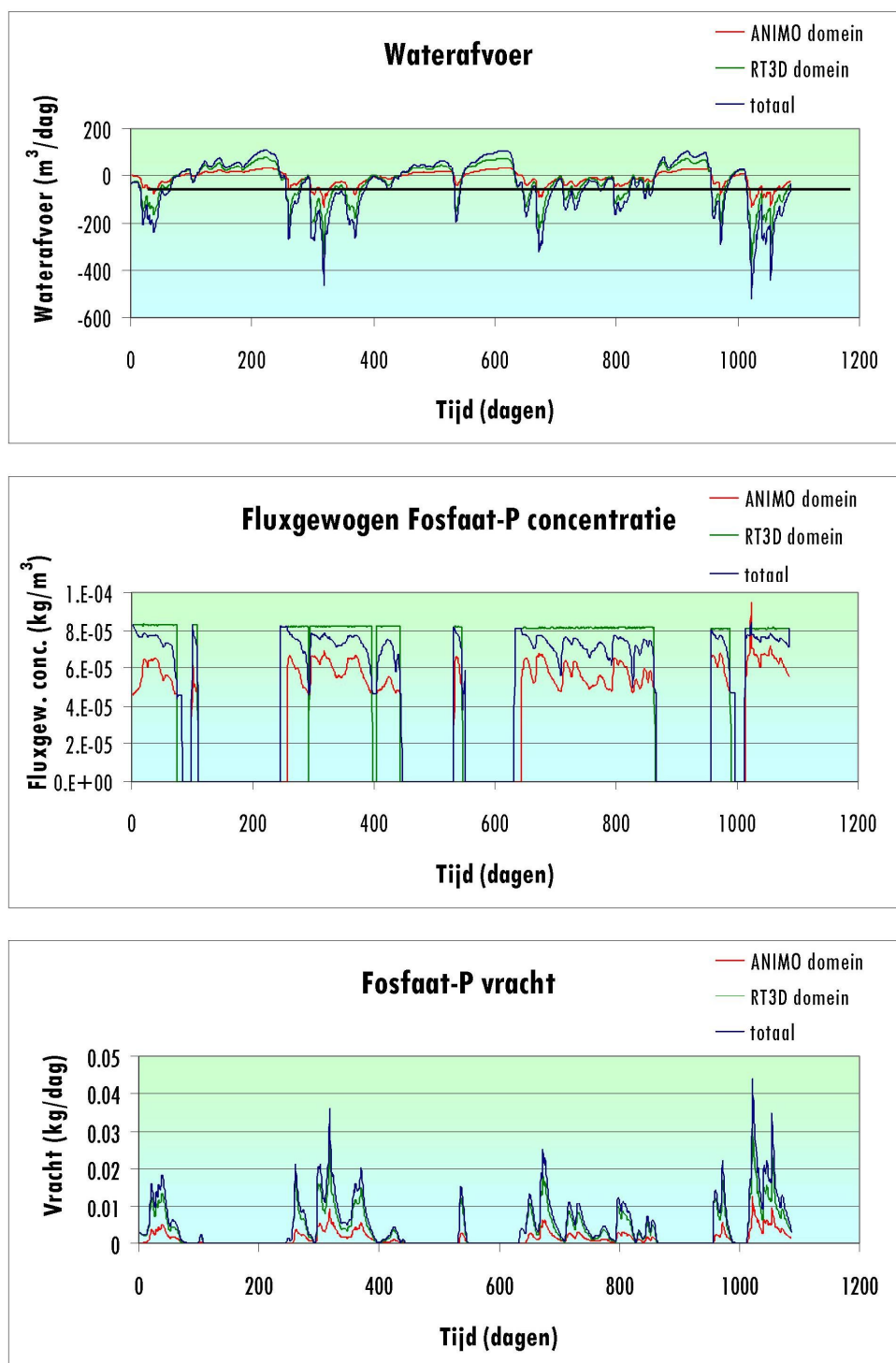
De lagere fosfaatvrachten uit het ANIMO-domein t.o.v. het RT3D-domein (Figuur 7.7c) zijn, net als in het geval van ammonium, het resultaat van de combinatie van lagere fluxgewogen concentraties en kleinere waterafvoeren richting het oppervlaktewater.



Figuur 7.5. Resultaten voorbeeldberekening voor Nitraat.



Figuur 7.6. Resultaten voorbeeldberekening voor Ammonium.



Figuur 7.7. Resultaten voorbeeldberekening voor Fosfaat.

8 Evaluatie van de modelkoppeling

8.1 Wijze van koppelen

Voor ANIMO-RT3D 1.0 is gekozen het modeldomein op te splitsen in een ANIMO-domein en een RT3D-domein, en deze twee domeinen op tijdstapbasis met elkaar te laten communiceren. De gekozen aanpak heeft ons inziens de volgende voordelen:

- Beide modellen worden grotendeels intact gelaten en worden gebruikt op de, bij de modelleers die deze modellen reeds gebruiken, bekende manier.
- De methode tot koppeling heeft voorkomen dat zwaar ingegrepen moest worden in de code van een van beide modellen.
- Modelontwikkeling die op dit moment “aan beide kanten van het grensvlak” heeft plaatsgevonden en nog steeds plaatsvindt kunnen nog steeds toegepast worden en gebruikt worden om ANIMO-RT3D te verbeteren. Aan de RT3D-kant valt bijvoorbeeld te denken valt aan concepten voor opschaling van reactieve lagen, stroombaanberekeningen, parallelisatie etc.
- Door ANIMO als 1D-model te behouden kunnen de afzonderlijke modelkolommen parallel worden doorgerekend. Gezien het grote geheugengebruik en rekenintensiteit van ANIMO is parallelisatie onontbeerlijk.

Twee belangrijke alternatieven voor de gekozen koppelingswijze verdienen een aparte bespreking:

1. Het realiseren van een 3D versie van ANIMO. De 1D/quasi-2D opzet van ANIMO wordt hierbij verlaten en ANIMO wordt klaargemaakt voor het ontvangen van en omgaan met 3D-hydrologische termen afkomstig van bijvoorbeeld MODFLOW-MetaSWAP. Conceptueel is deze optie waarschijnlijk superieur aan het concept dat gehanteerd is in ANIMO-RT3D 1.0. Er hoeft geen grensvlak geïmplementeerd te worden en ook de zone boven de LGS (Laagst Gesimuleerde Grondwaterstand) kan volledig 3D worden gemodelleerd. Deze optie is minder arbeidsintensief dan de hieronder genoemde optie (volledige integratie van de ANIMO-processen in RT3D), mede doordat 2D laterale uitwisseling tussen modelkolommen in ANIMO al eens is georganiseerd voor gebruik in een FUSSIM2 (Heinen, 2001; Heinen en de Willigen, 2001) -omgeving. Een 3D-versie van ANIMO zou echter de mogelijkheid ontnemen de berekeningen te paralleliseren, aangezien er geen onafhankelijke modelcompartimenten meer zijn. Zoals hierboven reeds gesteld is parallelisatie van ANIMO noodzakelijk voor regionale modelstudies. Tenslotte is er nog geen postprocessor voorhanden die de hydrologische uitvoer van MODFLOW-MetaSWAP kan terugleiden naar driedimensionale termen op de SWAP-discretisatie, al is POSTMSW hiertoe redelijk eenvoudig aan te passen.

2. Een volledige integratie van de ANIMO-processen in RT3D. Dit komt neer op het overzetten van alle in ANIMO geformuleerde processen naar het RT3D-concept. Ook nu geldt dat er geen grensvlakimplementatie meer nodig is. Deze optie is echter in de beginfase van het ANIMO-RT3D-traject komen te vervallen vanwege het uiterst arbeidsintensieve karakter ervan. Het overbrengen van de benodigde in- en uitvoerstructuur en de veelheid aan transportprocessen naar de RT3D-concepten vereist een gigantische programmeer- en verificatie-inspanning. Bovendien resulteert het grote aantal modellen dat nodig is om de onverzadigde zone accuraat te modelleren bij regionale toepassingen in enorme transportmodellen die zonder parallelisatie waarschijnlijk te lange rekentijden opleveren. Parallelisatie van MT3D of RT3D wordt wel voorzien maar het valt niet te voorzien wanneer deze ontwikkeling plaats zal hebben en voltooid zal zijn.

Het spreekt voor zich dat voor beide alternatieven geldt dat de genoemde voordelen van de gekozen koppelingswijze niet gelden.

8.2 Aannames

In voorgaande hoofdstukken zijn een aantal belangrijke aannames gemeld waarvan bij de koppeling zoals toegepast in ANIMO-RT3D 1.0 gebruik is gemaakt. De belangrijkste aannames worden hieronder herhaald en hun implicaties kort toegelicht.

Aanname 1. Er vindt geen significante horizontale uitwisseling tussen modelkolommen plaats boven de LGS (Laagst Gesimuleerde Grondwaterstand).

Deze aanname was noodzakelijk omdat het in ANIMO-domein transport alleen in de verticale dimensie plaatsvindt. Laterale uitwisseling tussen modelkolommen boven de LGS wordt vermeden door de horizontale transmissiviteiten in MODFLOW-laag 1 en 2 op nul te zetten.

Het verschil tussen de Gemiddeld Hoogste Grondwaterstand (GHG) en de LGS bedraagt in de meeste gevallen 1 tot 1,5 m. In de wintersituatie zal in de praktijk tussen GHG en LGS een niet te verwaarlozen deel van het neerslagoverschot lateraal afstromen. De mate waarin dit tot meer of minder significante fouten in de uitkomsten van het hydrologische model leidt hangt af van de hoeveelheid afwatering per modelcompartiment (i.c. gridkolom): hoe meer afwatering er plaatsvindt binnen de modelkolom, hoe meer de laterale stroming die in deze modelcel haar oorsprong vindt binnen diezelfde kolom tot afwatering komt en dus niet resulteert in laterale uitwisseling tussen modelkolommen.

Dit betekent dat twee factoren van invloed zijn op de modelfout als resultaat van de verwaarlozing van horizontale uitwisseling tussen modelkolommen:

- de ruimtelijke discretisatie van het model. Indien het model in de horizontaal is onderverdeeld in grotere deelcompartimenten (i.c. gridcellen), zal i.h.a. een groter deel van het neerslagoverschot dat binnen een deelcompartiment infiltreert, maar niet in dit deelcompartiment het grensvlak bereikt, binnen datzelfde deelcompartiment via drainagemiddelen tot uitstroom komen. Daarbij komt dat bij grotere gridcellen een groter deel van het neerslagoverschot het grensvlak wél bereikt voordat de naastgelegen modelkolom bereikt wordt.
- de drainagedichtheid. In sterk gedraineerde gebieden zullen de stroombanen met laterale componenten die zo sterk zijn dat ze binnen de modelkolom het grensvlak niet bereiken, op korte afstand tot uitstroom komen. Horizontale uitwisseling tussen modelkolommen blijft boven het grensvlak dan beperkt. In ongedraineerde gebieden, bijvoorbeeld infiltratiegebieden, kunnen de laterale stroombanen grotere afstanden beslaan, wat leidt tot grotere uitwisseling tussen modelcompartimenten en daardoor grotere modelfouten.

De gemaakte aanname kan dus vooral tot modelfouten leiden indien de horizontale modeldiscretisatie te fijn wordt gekozen, of de laterale stroming vanwege afwezige drainage ver kan reizen alvorens het grensvlak of een drainagemiddel bereikt wordt. Bij de laatstgenoemde situatie moet bedacht worden dat in ongedraineerde situaties sterke laterale termen tussen GLG en GHG onwaarschijnlijk zijn, met uitzondering van sterk hellende gebieden. De genoemde beperking voor de horizontale modeldiscretisatie leidt ertoe dat de aanname alleen werkbaar is in modellen van een voldoende groot schaalniveau welke vanwege dit grotere schaalniveau zijn onderverdeeld in modelkolommen met een groter oppervlak. Omdat sterk hellende gebieden in Nederland weinig voorkomen en er in dergelijke gebieden bovendien vaak geen landbouw plaatsvindt (denk aan de grote oppervlakten aan natuur in op de Veluwe, de Utrechtse Heuvelrug en Zuid-Limburg), en omdat ANIMO-RT3D

1.0 is gericht op de regionale schaal waarbij gedacht wordt aan gridcellen van tenminste 100 bij 100 meter, wordt verwacht dat Aanname 1 gemaakt kan worden zonder de nauwkeurigheid van de hydrologische modellering teveel geweld aan te doen voor regionale toepassingen. Deze hypothese kan in werkelijke toepassingen gecontroleerd worden door het hydrologische model tweemaal door te rekenen (met en zonder laterale stroming boven het grensvlak) en de resultaten (stijghoogtes, stroombanen, afvoeren) onderling te vergelijken.

Aanname 2. De temperatuur in het RT3D-domein wordt constant verondersteld.

Het is bekend dat er op twee meter diepte nog steeds seizoensinvloeden zijn op de omzettingssnelheden. Het verdient daarom aanbeveling om in de toekomst het meenemen van deze invloed ook in het RT3D-domein mogelijk te maken.

Aanname 3. Gebruik van MetaSwap-MODFLOW met ontwatering berekend door DRN-package van MODFLOW

In de huidige opzet is verondersteld dat de afvoer naar het oppervlaktewater wordt berekend door de DRN-module van MODFLOW. Deze beperking is echter niet essentieel voor de geïmplementeerde modelkoppeling. Indien de drainage zou worden berekend door MetaSwap binnen een SIMGRO7-model, dan is het ANIMO-RT3D model hier op eenvoudige manier op aan te passen in de POSTMSW-routine, waarin informatie vanuit zowel MetaSwap als MODFLOW wordt bewerkt. Een voorwaarde blijft echter wel dat tussen de ANIMO kolommen onderling geen laterale uitwisseling kan plaatsvinden.

8.3 Geheugengebruik

Voor de ontwikkeling van ANIMO-RT3D 1.0 is nog geen aandacht besteed aan de optimalisatie van de performance van de code, zowel wat betreft rekensnelheid als geheugengebruik. Tijdens de runs die uitgevoerd zijn met het prototype ANIMO-RT3D 1.0 is gebleken dat met een 32-bits PC en een 32-bits compiler het maximaal aantal door te rekenen kolommen in ANIMO rond de 1000 ligt. Voor toepassing in regionale modelleerstudies is het wenselijk het maximaal aantal door te rekenen ANIMO-kolommen te vergroten met een factor 100 zodat er minimaal 100000 kolommen gelijktijdig doorgerekend worden. Ter impressie: twee beoogde pilotgebieden voor validatie van de modelcode, t.w. Quarles van Ufford en Drentse Aa zoals geparameteriseerd voor ANIMO binnen het project Monitoring Stroomgebieden, beslaan respectievelijk 13000 en 30000 ha, wat bij de gebruikte horizontale discretisatie in modelkolommen van 100x100m neerkomt op respectievelijk 13000 en 30000 ANIMO-kolommen.

Dit kan bereikt worden door enerzijds het geheugengebruik van ANIMO te optimaliseren en anderzijds de geheugencapaciteit te vergroten. Er zijn diverse mogelijkheden voorhanden die het geheugengebruik van ANIMO terug kunnen dringen:

- Optimalisatie van de parameters in de ANIMO-include file Param.inc. In deze file worden de maximale dimensies van veel van de ANIMO-arrays opgegeven.
- Dynamische geheugenallocatie en geheugen-"release" op strategische locaties in de ANIMO-code. Met name na het gedeelte van de ANIMO-code waarin de verschillende kolommen worden voorbereid (inlezen en bewerking van invoer) worden veel arrays "overbodig". Als het geheugen dat deze arrays innemen dynamisch wordt gealloceerd kan dit geheugen zodra dat mogelijk is weer vrijgemaakt worden.
- Op dit moment worden alle ANIMO-variabelen omgezet naar ruimtelijke arrays (de kolomdimensie toegevoegd). Dat is niet voor alle variabelen nodig: veel variabelen zullen dus ten onrechte een kolomdimensie hebben gekregen, wat ruimte kost.

- Modelinvoer wordt op dit moment per ANIMO-kolom afzonderlijk ingeladen. In werkelijke cases zal de ANIMO-invoer niet voor elke kolom verschillen, maar zal sprake zijn van een beperkter aantal groepen ("plots") met dezelfde combinatie van bodemtype, bodemopbouw, landgebruik e.d. en daardoor met dezelfde ANIMO-invoer. Effectief houdt dit in dat alleen de arrays die variabelen bevatten die in de tijd kunnen veranderen, waarbij die verandering per kolom anders kan zijn, een ruimtelijke dimensie hoeven te hebben die gelijk is aan het aantal gemodelleerde kolommen. Voor niet-veranderlijke invoerparameters is een ruimtelijke dimensie gelijk aan het aantal "plots" voldoende.

In een vervolgtraject dienen van deze mogelijkheden de meest kansrijke geïdentificeerd te worden. De werkelijke winst die hiermee geboekt kan worden zal moeten blijken uit de implementatie ervan. Vooraf is dit moeilijk in te schatten.

Er zijn twee manieren voorhanden om de geheugencapaciteit te vergroten

- Een overstap naar een 64-bits-compiler en een 64-bits PC vergroot het beschikbare geheugen voor het programma.
- Indien bovengenoemde optimalisatiestappen niet voldoende blijken te zijn om ANIMO-RT3D op 1 PC te compileren en te runnen dient ANIMO verdeeld te worden over meerdere PC's (gedistribueerd rekenen). Elke PC neemt dan een deel van de gemodelleerde regio voor zijn rekening. Dit is gemakkelijk te implementeren doordat de ANIMO-kolommen geen interactie met elkaar hebben, maar alleen communiceren met het RT3D-domein. Er moet wel bedacht worden dat alle computers waarover ANIMO verdeeld wordt permanent beschikbaar moeten blijven voor de berekening. Dit is anders dan hoe parallelisatie van computerberekeningen normaal gesproken werkt, waarbij de uitval van een PC op het grid ondervangen kan worden door het opnieuw uitzetten van de berekening waar die PC op dat moment mee bezig was. In het geval van het verdelen van de ANIMO-werklast over meerdere PC's is dit niet mogelijk, doordat het verlies van een PC het verlies van het geheugen dat die PC voor zijn rekening genomen betekent, en dit geheugen is op geen enkele andere PC als back-up aanwezig.

8.4 Rekensnelheid

De voor dit rapport uitgevoerde synthetische case, waarin 3 jaar werden doorgerekend met een tijdsstap van 1 dag op een grid bestaande uit 120 kolommen, kostte ongeveer 120 minuten aan rekentijd. De verhouding tussen de rekentijd van RT3D en ANIMO bedroeg ongeveer 1:6. Uitgaande van deze verhouding heeft RT3D in de synthetische case ongeveer 20 minuten gerekend en ANIMO 100 minuten.

Indien de rekentijd van ANIMO lineair wordt geëxtrapoleerd om een indicatie te krijgen van de benodigde rekentijd voor een regionale case bestaande uit eenzelfde aantal lagen maar met 30000 kolommen (case Drentse Aa Monitoring Stroomgebieden) i.p.v. 120, levert dit een rekentijd op van 25000 minuten oftewel 420 uur rekentijd. Dit komt neer op 140 uur rekentijd per jaar simulatieperiode. Hierbij moet wel bedacht worden dat de dimensionering van ANIMO op geen enkele wijze is geoptimaliseerd. Zo rekende ANIMO bijvoorbeeld met 35 lagen, terwijl een groot aantal hiervan permanent tot het RT3D-domein behoorde en dus niet in ANIMO meegenomen hoefde te worden.

De verwachte rekentijd van RT3D in dezelfde regionale case valt moeilijk te voorspellen. Dit hangt af van de snelheid waarmee per transportstap convergentie wordt bereikt, en bovendien van het aantal benodigde transportstappen per tijdsstap (automatisch door RT3D

bepaald om aan de stabiliteitscriteria te voldoen). In de voor dit rapport uitgevoerde synthetische case waren de transportstappen relatief erg klein (0.028 dag) wat veroorzaakt werd door de relatief hoge dispersie i.c.m. relatief dunne modellagen (min. 10 cm). De grootte van de transportstappen is sterk case-afhankelijk en wordt bepaald door gemodelleerde stroomsnelheden, gridcelgroottes en opgegeven dispersie.

Het is wenselijk de rekensnelheid van ANIMO-RT3D met een factor 50 tot 100 te reduceren. De meest voor de hand liggende methode om hierin een grote slag te slaan is het paralleliseren van de ANIMO-berekeningen. Zoals gezegd is het parallel doorrekenen van de ANIMO-kolommen eenvoudig te implementeren doordat de kolommen niet met elkaar communiceren. Indien het ANIMO-gedeelte wordt geparallelliseerd en over een computergrid bestaande uit bijvoorbeeld 50 PC's kan worden uitgevoerd, wordt de rekentijd van het ANIMO automatisch met een factor 50 verkleind (verlies van efficiëntie als gevolg van data-overdracht over het grid buiten beschouwing gelaten).

Bij Deltares bestaat tevens het voornemen om MT3D te paralleliseren. Zodra deze ontwikkeling heeft plaatsgevonden loont het de moeite om de processen die nu t.b.v. de koppeling met ANIMO in RT3D zijn geïmplementeerd over te zetten naar MT3D, om te kunnen profiteren van de extra rekenkracht die een geparallelliseerde versie van MT3D biedt. Op dit moment bestaan er geen mogelijkheden de reketijden van RT3D te beperken, behalve door te proberen door een slimme keuze van laagdiktes de transportstappen te maximaliseren.

LITERATUUR

Clement, T.P. 1997. *RT3D (Version 1.0): a modular computer code for simulating reactive multi-species transport in 3-dimensional groundwater systems*. Pacific Northwest National Laboratory report PNNL-11720. Richland.

Clement, T.P. 2003. *What's new in RT3D version 2.5*. http://bioprocess.pnl.gov/publicn/RT3Dv25_Update.pdf.

Groenendijk, P., L.V. Renaud en J. Roelsma. 2005. *Prediction of nitrogen and phosphorus leaching to groundwater and surface waters; Process descriptions of the ANIMO 4.0 model*. Alterra report 983. Wageningen.

Heinen, M. 2001. FUSSIM2: brief description of the simulation model and application to fertigation scenarios. *Agronomie*, 21, 285-296.

Heinen, M., & P. de Willigen. 2001. FUSSIM2 version 5. New features and updated user's guide. Alterra rapport 363, Alterra, Wageningen.

Peters, E. en J. Griffioen (2005). Poriewaterstroming en –transport op perceelschaal: quasi-2D versus 2D-benadering. *Stromingen* 11(2).

Peters, E. en J. Griffioen (2006). Diffuse loading of surface water from groundwater in areas with shallow groundwater tables: quasi-2-D vs 2-D simulation. In: Bierkens, M.F.P., J.C. Gehrels en K.Kovar (eds.). *Calibration and reliability in groundwater modeling: from uncertainty to decision making*. Proceedings of the ModelCARE 2005 conference, Den Haag 6-9 juni 2005. IAHS Press, Wallingford.

Renaud, L.V., J. Roelsma en P. Groenendijk. 2006. *User's Guide of the ANIMO 4.0 nutrient leaching model*. Alterra report 224. Wageningen.

Snepvangers, J. en W. Berendrecht. MIPWA: *Methodieontwikkeling voor interactieve planvorming ten behoeve van het waterbeheer*. TNO-rapport 2007-U-R0972/A.

Therrien, R., R.G. McLaren, E.A. Sudicky en S.M. Panday. 2007. *HydroGeoSphere; A three-dimensional numerical model describing fully-integrated subsurface and surface flow and solute transport: User manual*. Waterloo, Ontario, Canada

Walsum, P.E.V. van, A.A. Veldhuizen, P.J.T. van Bakel, F.J.E. van der Bolt, P.E. Dik, P. Groenendijk, E.P. Querner en M.F.R. Smit. 2006. SIMGRO 6.0.2. Theory and model implementation. Alterra report 913.1. Wageningen

Zheng, C. en P.P. Wang. 1999. *MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide*. US Army Corps of Engineers Contract Report SERDP-99-1. Washington.

