



Gijs Janssen, Deltares
 Jasper Griffioen, Deltares
 Bas van der Grift, Deltares
 Piet Groenendijk, Alterra

3D-modellering van nutriëntentransport door bodem en grondwater

Deltares heeft samen met Alterra een concept ontwikkeld voor driedimensionale modellering van nutriëntentransport. Door ANIMO te koppelen aan RT3D wordt de kennis over nutriëntenprocessen in de bodem gekoppeld aan transportprocessen in het diepere grondwater. Hiermee kan men de bijdrage van de uitspoeling uit de bodem aan de oppervlaktewaterkwaliteit, de afhankelijkheden tussen gebieden en de mate van bedreiging van bijvoorbeeld grondwaterlichamen en drinkwaterwinningen beter inschatten en voorspellen. Tegelijkertijd wordt een voorzet gegeven voor de invulling van een onderdeel van de kwaliteitsmodellering in het hydrologische modelspoor van het Nationaal Hydrologisch Instrumentarium.

Voor het formuleren van (kosten)effectieve en efficiënte maatregelen ter verbetering van de regionale oppervlaktewaterkwaliteit en bescherming van de kwaliteit van grondwaterlichamen is het noodzakelijk dat een gedegen inzicht bestaat in de herkomst van de verontreinigingen en de bijdragen van de bronnen aan de waterkwaliteit. Daarnaast bestaat voor diverse kaders (bijvoorbeeld KRW en Nitraatrichtlijn) de noodzaak van inzicht in de autonome ontwikkeling van de grond- en oppervlaktewaterkwaliteit, en de verandering in die ontwikkeling na implementatie van voorgenomen maatregelen. Om dergelijke inzichten te verkrijgen, is modellering onontbeerlijk.

Het meest verfijnde en toonaangevende nutriëntentransportmodel in het Nederlandse modellenlandschap is ANIMO¹⁾. ANIMO draait op ééndimensionale of quasi-tweedimensionale (SWAP-) hydrologie. Hierdoor is ANIMO in principe een veldschaalmodel, omdat ruimtelijke variatie in systeemeigenschappen (bijvoorbeeld landgebruik, bodemopbouw en (geo)hydrologische situatie) niet in de ene dimensie van SWAP en ANIMO verwerkt kan worden. Door ANIMO echter afzonderlijk te draaien voor ruimtelijk verdeelde eenheden, kan het model toch ruimtelijk verdeelde invoer genereren en op die manier gebruikt worden op hogere schaalniveaus. Dit

gebeurt bijvoorbeeld in de pilotgebieden van Monitoring Stroomgebieden (regionale schaal) en in STONE (landsdekkende schaal).

Een belangrijke eigenschap van de SWAP/ANIMO-combinatie is dat de onverzadigde en verzadigde zone als één entiteit beschouwd worden, waardoor de uitwisseling tussen deze domeinen vloeiend wordt gemodelleerd zonder dat daar een modelkoppeling voor nodig is. Een nadeel van de quasi-2D-aanpak is echter onder andere dat laterale uitwisseling door transport in het grondwater tussen de plots niet mogelijk is. Hiermee is de geldigheid van het concept beperkt tot een bepaalde diepte, omdat met de diepte de laterale componenten van grondwaterstroming belangrijker worden, en daarmee de laterale uitwisseling tussen de plots.

Hoewel de diepte tot waar het quasi-2D concept geldig geacht kan worden afhangt van onder andere de bodemopbouw, de ruimtelijke schaal van het model en de mate van heterogeniteit tussen de ruimtelijk verdeelde eenheden, kan in zijn algemeenheid gesteld worden dat de rol van diepere grondwaterstroming niet goed in dit concept kan worden gerepresenteerd. Daarmee vervalt de mogelijkheid om bijvoorbeeld de invloed van bemesting in een bepaald gebied op het grond- en kwelwater in een ander gebied te simuleren. Bovendien kunnen de risico's voor dieper gelegen

bedreigde objecten, zoals drinkwaterwinningen en grondwaterlichamen, niet met dit concept geëvalueerd worden.

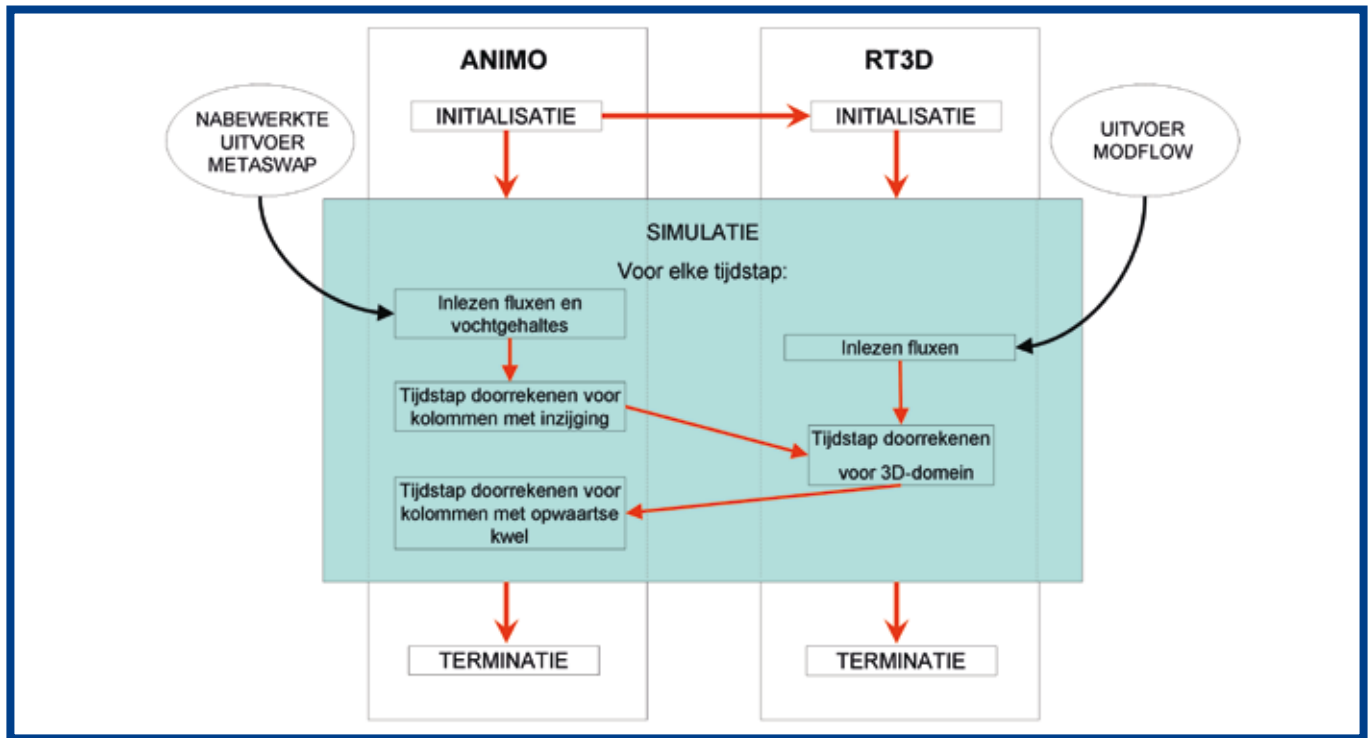
ANIMO-RT3D

RT3D is een driedimensionale transportcode voor stoftransport in de verzadigde zone. Het kan gezien worden als een afgeleide van het beter bekende MT3DMS: de broncodes zijn grotendeels identiek, maar RT3D biedt een additionele optie om op modulaire wijze zelf de gewenste (multicomponent)reacties te definiëren. Door ANIMO te koppelen aan RT3D en het gewenste nutriëntengedrag daarin te implementeren, wordt het mogelijk om de in ANIMO besloten proceskennis driedimensionaal in te zetten en daarmee toe te passen op regionale schaal. ANIMO beschrijft het landgebruik, de bodem/plant-interacties en het stoftransport in de onverzadigde zone en het bovenste grondwater. Vanaf de diepte waaronder driedimensionale stroming belangrijk kan worden, neemt RT3D het over.

Keuze van het grensvlak

Bij de keuze van het grensvlak in een ANIMO-RT3D-simulatie moet rekening gehouden worden met twee tegenstrijdige belangen:

- Het grensvlak moet diep genoeg zijn opdat voorkomen wordt dat onverzadigde condities ontstaan in het RT3D-domein. RT3D kan hier namelijk niet mee overweg en bovendien is in RT3D alleen die chemie



Afb. 1: Het stroomschema van ANIMO-RT3D.

overgenomen uit ANIMO die van belang wordt geacht voor permanent verzadigde omstandigheden;

- Het grensvlak moet binnen bovengenoemde randvoorwaarde zo hoog mogelijk liggen, omdat horizontale stroming boven het grensvlak niet mogelijk is vanwege het ééndimensionale karakter van ANIMO.

De beste keuze voor het grensvlak is daarom een ruimtelijk variabel vlak van de laagste grondwaterstand per modelkolom gedurende de gesimuleerde periode. Het grensvlak volgt daarom uit de simulatie met het hydrologische model dat de fluxen aanlevert aan ANIMO-RT3D voor transportmodellering: het grensvlak wordt per modelkolom gepositioneerd op de onderkant van de modellaag van de laagste gesimuleerde grondwaterstand.

Modellering waterstroming

De hydrologische invoer voor het transportmodel (dat wil zeggen het fluxenveld) wordt aangeleverd door de modelkoppeling MODFLOW-MetaSWAP²⁾. Deze ligt tevens ten grondslag aan het Nationaal Hydrologisch Instrumentarium en de nieuwe generatie regionale grondwaterstromingsmodellen van Deltares en Alterra. Daarom sluit transportmodellering met ANIMO-RT3D aan bij recente ontwikkelingen in hydrologische modellering, wat een belangrijk voordeel is. De MODFLOW-uitvoer (fluxen) dient nu als invoer voor RT3D. De MetaSWAP-uitvoer (fluxen en watergehaltes) is na bewerking geschikt als invoer voor ANIMO.

Modellering chemie

Zoals gezegd kan de RT3D-gebruiker zelf de gewenste reacties programmeren. Voor ANIMO-RT3D zijn alle in ANIMO gemodelleerde processen, die voor het permanent verzadigde domein nog relevant worden

geacht, beschreven in RT3D. Daarbij wordt aangenomen dat de aeratie in het RT3D-domein nihil is en processen waarvoor aeratie nodig is (zoals nitrificatie en aerobe afbraak) niet in het RT3D-domein kunnen optreden. Dit is overigens in overeenstemming met ANIMO, waarin deze processen ook niet optreden in verzadigde omstandigheden. Ook de interactie met de vegetatie en het landbouwmanagement in ANIMO hoeven niet in RT3D opgenomen te worden, aangezien het RT3D-domein vanwege zijn definitie altijd enige afstand tot het maaiveld zal hebben.

Dit alles heeft tot gevolg dat RT3D zich kan beperken tot het berekenen van de volgende processen: afbraak van organische stof, opgelost organische stof (DOC), opgelost organisch stikstof (DON) en opgelost organisch fosfaat (DOP), assimilatie van organische stof in humus/biomassa, denitrificatie, sorptie en mineralisatie/immobilisatie van ammonium, en sorptie, mineralisatie/immobilisatie en precipitatie van fosfaat. Tussen ANIMO en RT3D worden op tijdstap-basis de volgende stoffen uitgewisseld: nitraat, ammonium, fosfaat, DOC, DON en DOP. Een grenszone bestaande uit twee modellagen (één onder en één boven het grensvlak) die zowel in ANIMO als in RT3D bestaan, fungeert daarbij als doorgeweeld. Deze modellagen bevatten steeds de geactualiseerde randvoorwaarde voor de ANIMO- en de RT3D-berekeningen.

Rekenschema

Afbeelding 1 toont een vereenvoudigde weergave van het rekenschema van ANIMO-RT3D. Uit dit schema wordt duidelijk dat ANIMO de transportsimulatie aanvangt met de initialisatie van alle modelkolommen (inlezen en verwerken van modelinvoer). Zodra ANIMO hiermee klaar is, begint RT3D zijn initialisatie, waarbij optioneel ook

gebruik gemaakt kan worden van de door ANIMO ingelezen informatie zoals initiële concentraties. ANIMO vangt ondertussen de loop over de tijdstappen aan, waarbij het begint met het inlezen van de hydrologische informatie vanuit MODFLOW-METASWAP.

Op basis van deze informatie wordt geëvalueerd in welke kolommen over het grensvlak inzijing plaatsheeft en in welke kolommen opwaartse stroming over het grensvlak optreedt. Dit is nodig omdat de ANIMO-kolommen met opwaartse stroming niet doorgerekend kunnen worden voordat RT3D de tijdstap heeft doorgerekend. RT3D kan echter niet beginnen aan de tijdstap voordat ANIMO de kolommen met inzijing heeft doorgerekend om de bovenrandvoorwaarde aan te leveren. Ergo, binnen een tijdstap berekent eerst ANIMO alle infiltrerende kolommen, rekt vervolgens RT3D met de geactualiseerde bovenrandvoorwaarde de tijdstap door (voor het gehele RT3D-domein) en berekent ANIMO ten slotte met de geactualiseerde onderrandvoorwaarde de kolommen met opwaartse stroming. Daarna begint ANIMO direct met de volgende tijdstap.

Rekenvoorbeeld

De modelkoppeling is getest op synthetische 1D- en 3D-modellen. Bij de 1D-test lag de nadruk op het valideren van de in RT3D ingebrachte chemie; in een 1D-model zou deze dezelfde resultaten moeten geven als origineel ANIMO. De 3D-test bood de mogelijkheid de gehele modelvoorbereiding en -postprocessing (bijvoorbeeld de definitie van het grensvlak, de daarop aangepaste verticale discretisatie van het modelgebied, invoer- en uitvoerstructuur) te doorlopen en te controleren, evenals de inzet van ANIMO in een ruimtelijk gedistribueerd model en de ruimtelijk gedistribueerde uitwisseling tussen ANIMO en RT3D.

Afbeelding 2 geeft het modelresultaat voor ammonium van de 3D-test. Deze bestaat uit een rechthoekig model (twaalf rijen x tien kolommen, met elf modellagen in het ANIMO-domein en tien lagen in het RT3D-domein), waarbij de parametrisatie van de modellagen grotendeels is ontleend aan een voorbeeldparametrisatie uit de ANIMO-handleiding³⁾. Alle modelkolommen hebben dezelfde parametrisatie.

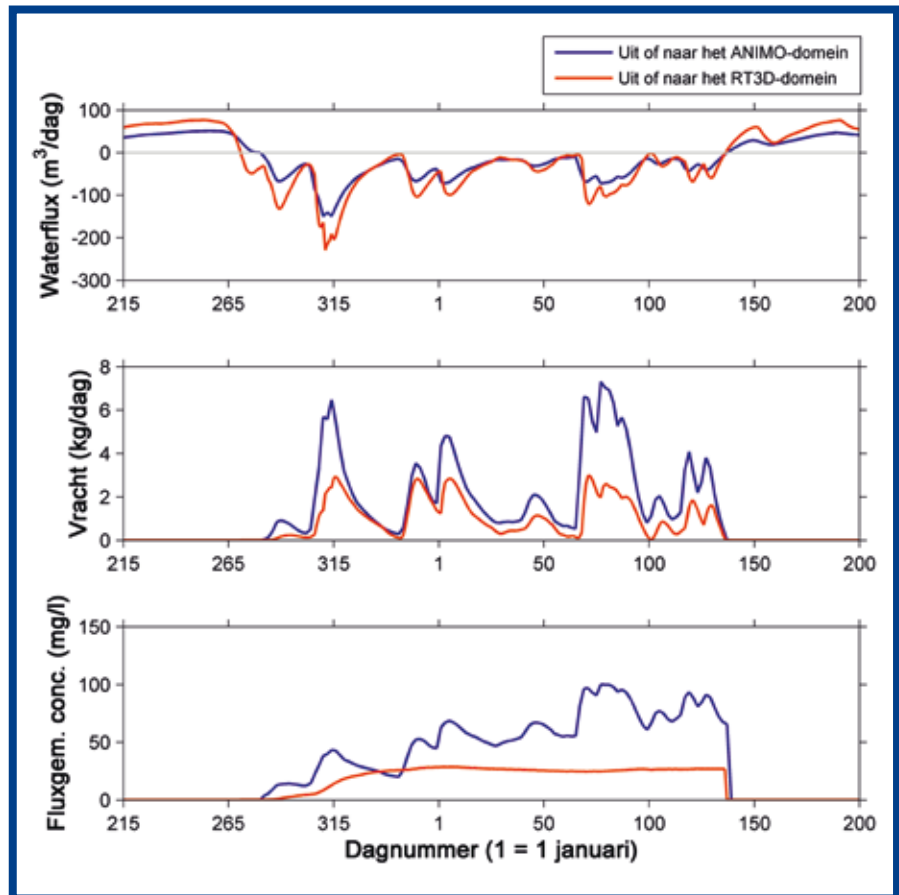
In het model zijn twee parallelle waterlopen opgenomen: linksboven (kolom 1, rij 1-12) en rechtsboven (kolom 10, rij 1-12). Deze waterlopen doorsnijden de bovenste modellagen tot en met de eerste laag onder het grensvlak. Uitspoeling naar de waterlopen heeft dus zowel plaats vanuit het ANIMO- als het RT3D-domein. Beide bijdragen worden in afbeelding 2 weergegeven, evenals hun som (voor de waterflux en ammoniumvrucht) en fluxgewogen gemiddelde (voor de fluxgewogen ammoniumconcentratie). Voor verdere details en uitleg van de modelresultaten wordt verwezen naar het rapport over de modelkoppeling⁴⁾.

Hoe nu verder

In eerste instantie wordt beoogd met het nieuwe instrumentarium vooral regionale modelstudies uit te voeren, daarbij aansluitend bij de hoge-resolutie grondwaterstromingsmodellen die inmiddels voor vele regio's zijn ontwikkeld (MIPWA, MORIA, IBRAHYM, Amigo). Op dit moment wordt gewerkt aan studies in de Drentse Aa en het westelijk deel van het Land van Maas en Waal (het bemalingsgebied Quarles van Ufford). De studies hebben tot doel de bruikbaarheid van de methode aan te tonen en te laten zien op welke punten ANIMO-RT3D meerwaarde biedt ten opzichte van de nu gangbare rekenmodellen. Naast deze regionale studies moet de toepasbaarheid van ANIMO-RT3D ook op lokale schaal nog geëvalueerd worden.

Het nieuwe instrumentarium leent zich uitstekend voor het toepassen van de geboekte vooruitgang op het gebied van driedimensionale karakterisering van de Nederlandse ondergrond, zowel wat betreft doorlatendheid als geochemie⁵⁾. De regionale transportmodellen kunnen gebruikt worden om de ontwikkeling van de grondwaterkwaliteit en de transportroutes door het grondwater beter dan voorheen in beeld te brengen. In gebieden waar veranderingen in de stroming en de kwaliteit van regionaal grondwater van invloed zijn op de kwaliteit van het oppervlaktewater (bijvoorbeeld beekdallandschap), is door de ontwikkeling van ANIMO-RT3D een betere voorspelling van de oppervlaktewaterbelasting te verwachten; deze diffuse bron vormt op dit moment een onzekere factor in bijvoorbeeld de KRW-Verkenner⁶⁾ en de Emissiemodule⁷⁾.

Technisch gezien ligt een parallelisatie van ANIMO-RT3D voor de hand, omdat de modelkolommen van ANIMO onafhankelijk van elkaar doorgerekend worden en parallelisatie van MT3DMS al door Deltares tot stand is gebracht. Daarmee wordt uiteraard het sneller



Afb. 2: Een modelresultaat van ANIMO-RT3D. Getoond worden, voor een willekeurige periode, de waterflux naar de waterlopen in het model (een flux kleiner dan nul betekent drainage), de totale nitraatvrucht naar de waterlopen en de fluxgemiddelde nitraatconcentratie van het drainagewater. De fluxgemiddelde concentratie wordt berekend door de vrucht te delen door de waterflux. Bij de resultaten is een opsplitsing gemaakt in een bijdrage van het ANIMO-domein en een bijdrage van het RT3D-domein. De totale flux en vrucht is dus de som van beide termen. De samengestelde fluxgemiddelde concentratie is een fluxgewogen gemiddelde van de ANIMO- en RT3D-bijdrage. De dagelijkse variatie in de getoonde resultaten is vrij gering; dit is het gevolg van het feit dat in het gebruikte MODFLOW-MetaSWAP model geen snelle afvoerroutes, zoals buisdrainage en maaierveldafvoer, waren opgenomen. ANIMO-RT3D vormt echter geen beperking voor het opnemen van dergelijke routes.

doorrekenen van grotere gebieden mogelijk en komen landsdekkende toepassingen in beeld. Het voordeel van het direct kunnen aansluiten bij de NHI-hydrologie is evident.

7) Penailillio R., H. Pomarius, R. van de Weerd en M. Hehenkamp (2010). Emissiemodule als schakel tussen emissiegegevens en waterkwaliteitsmodellen. H₂O nr. 3, pag. 9-11.

LITERATUUR

- 1) Groenendijk P., L. Renaud en J. Roelsma (2005). Prediction and phosphorus leaching to groundwater and surface waters; process descriptions of the ANIMO 4.0 model. Alterra. Rapport 983.
- 2) Van Walsum P., A. Veldhuizen, P. van Bakel, F. van der Bolt, P. Dik, P. Groenendijk, E. Querner en M. Smit (2006). SIMGRO 6.0.2. Theory and model implementation. Alterra. Rapport 913.1.
- 3) Renaud L., J. Roelsma en P. Groenendijk (2006). User's guide of the ANIMO 4.0 nutrient leaching model. Alterra. Rapport 224.
- 4) Janssen G., B. van der Grift, J. Griffioen en P. Groenendijk (2009). ANIMO-RT3D 1.0; online koppeling van ANIMO en RT3D voor dynamische modellering van nutriëntentransport op regionale schaal. Deltares. Rapport 2008-U-R1289/A.
- 5) Van Gaans P. J. Griffioen, G. Mol, G. Klaver en J. Klein (2010). Geochemische karakterisering van de ondiepe ondergrond van Nederland. Aanpak voor bemesting en analyse. Bodem nr. 4, pag. 9-11.
- 6) Driesprong A., P. Paulus, J. Goossen en E. de Bruine (2008). KRW-Verkenner toegepast op de wateren in Zeeuws-Vlaanderen. H₂O nr. 1, pag. 34-36.