

# HOA (ELEC - ANCH) vorderingsverslag:

## Klimaatreconstructie:

### Experimenten, Modellen en Complexiteit

Het hoofddoel van de oorspronkelijke aanvraag is het ontwikkelen van technieken om de informatie gevat in omgevingsarchieven om te zetten naar bruikbare klimaatinformatie: wat vertelt de gemeten variatie in een archief ons over de complexiteit van het achterliggende fysische klimaat? Er een concrete en fundamentele bijdrage geleverd op de vijf voorgestelde niveaus:

1. de vervorming van de tijdsbasis;
2. eliminatie van systematische fouten;
3. koppeling van omgevingsarchieven aan klimaatparameters;
4. koppeling van klimaatparameters aan fysische klimaatmodellen;
5. verbetering van bestaande kennis m.b.t. CO<sub>2</sub> opname door de oceanen.

Om dit doel te bereiken, zijn alle stappen, vanaf het verzamelen van data tot en met de modelselectie nauwkeurig op elkaar afgestemd en is de voortplanting van mogelijke model- en meetfouten geanalyseerd. Daarvoor zijn methoden uit de systeemidentificatie (signaalverwerking en informatietheorie; zie bvb. [Pintelon en Schoukens, 2001]) gecombineerd met de expertise uit de respectievelijke vakgebieden.

Naast dit vijfvlak hebben we nog vier nevenprojecten uitgewerkt. De hoofdbetrachting hiervan was om het identificatiekader ook ingang te laten vinden in andere onderzoeksgebieden. Ervaring heeft ons geleerd dat dit het beste gaat door thesis- of doctoraatsstudenten een spoedcursus identificeerbaarheid te geven en hen vervolgens van nabij te begeleiden in het schrijven van de nodige algoritmen. Concreet is

- a. een model ontwikkeld dat is gebruikt in (5.) om biologische Barium consumptie in de Zuidzee te karakteriseren;
- b. het O<sub>2</sub> verloop in een rivierecosysteem geïdentificeerd;
- c. een model voorgesteld om koolstof in de Vlaamse bodem te koppelen aan bodemgebruik en – type;
- d. een algoritme ontwikkeld om Fur-gereguleerde genen in *Pseudomonas* te identificeren.

Deze negen luiken van dit interdisciplinaire project worden nu toegelicht.

In bijlage vindt u nog een lijst van

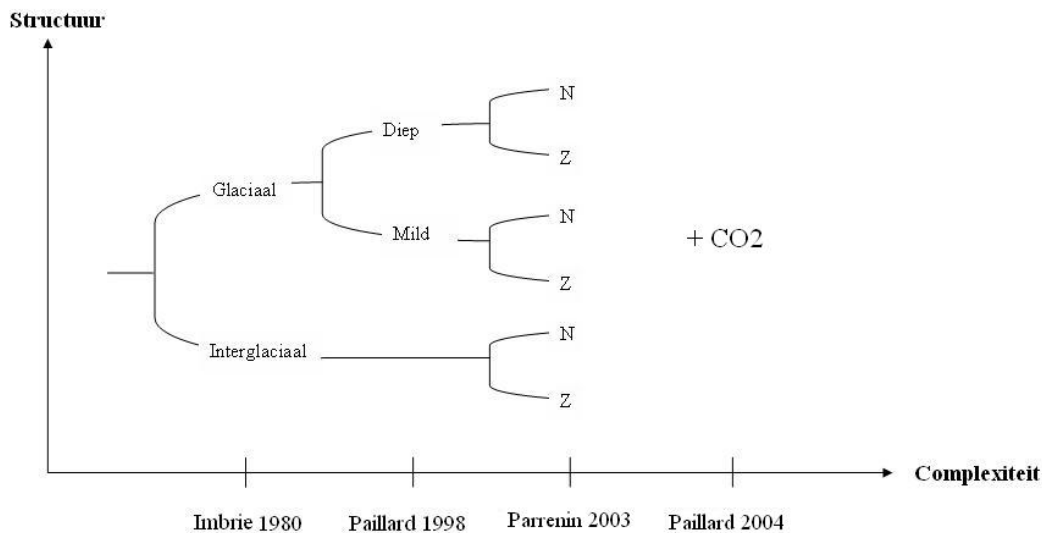
1. de publicaties die zijn voortgekomen uit dit project en
2. nieuwe projecten die de financiële onafhankelijkheid op termijn moeten garanderen.

## 1. De vervorming van de tijdsbasis & 4. Koppeling van klimaatparameters aan fysische klimaatmodellen

Indien koralen, schelpen of sedimenten gebruikt worden als archief, kunnen indicatoren van het vroegere klimaat gemeten worden langs de groei- of sedimentatie-as. Deze indicatoren voor het vroegere klimaat worden dus niet rechtstreeks gemeten in functie van de tijd, maar wel in functie van afstand.

Vooraleer deze informatie vergeleken kan worden met modellen die het vroegere klimaat verklaren, moet deze informatie van een afstandreeks naar een tijdreeks getransformeerd worden. Omdat de sedimentatie of groeisnelheid niet constant is, is deze transformatie niet triviaal. Dikwijls gebeurt dit door de afstandreeks met gesimuleerde modelwaarden te vergelijken. Dit leidt onvermijdelijk tot een contradictie: de modelparameters zijn geschat uitgaande van tijdreeksen. Deze tijdreeksen zelf zijn geconstrueerd adv. diezelfde modellen waarvoor we de parameters willen kennen. Concreet betekent dit inzicht dat klimaatparameters niet rechtstreeks uit een proxy-record geschat kunnen worden, maar dat ook de tijdsbasis geherevalueerd moet worden.

In dit luik van het onderzoek is nagegaan of het mogelijk is om modelparameters te schatten en tegelijkertijd de tijdsbasis voor de metingen te identificeren. Indien dit mogelijk is, bevatten de metingen voldoende informatie om de tijdsbasis te schatten simultaan met de modelparameters. Indien dit niet mogelijk is, zou het onmogelijk zijn om de gebruikte modellen te valideren, zonder bijkomende informatie over de tijdsbasis.



**Figuur 1: schematische voorstelling van de verschillende modellen en hun toenemende complexiteit.**

We hebben hiervoor vier modellen gebruikt. Al deze modellen zijn relatief eenvoudige black-box klimaatmodellen met één of enkele bifurcaties in (zie Figuur 1). De achterliggende veronderstellingen voor de modellen zijn echter verschillend. Het klimaat op Aarde gedraagt zich anders in een ijstijd, dan in een interglaciale periode -dit onderscheid werd voor het eerst gemaakt door Imbrie en Imbrie [1980]. Het model van Paillard [1998] maakt nog een bijkomend onderscheid en deelt de glaciële periodes in in milde en diepe glaciële periodes, die ieder door andere parameterwaarden beschreven worden. In de twee laatste modellen wordt respectievelijk een mogelijk verschillend gedrag van het zuidelijk en noordelijke halfrond onderzocht [Parrenin en Paillard, 2003], alsook de invloed van CO<sub>2</sub> [Paillard, 2004].

We hebben twee verschillende datasets gebruikt (Waelbroeck et al. [2002] en Bassinot et al. [1994]), die beide het globale ijsvolume weerspiegelen. De tijdschaal bedraagt ongeveer 400 kjaar.

Samengevat hebben we de volgende vragen beantwoord:

Wat is voor iedere dataset- model combinatie de beste tijdsbasis?

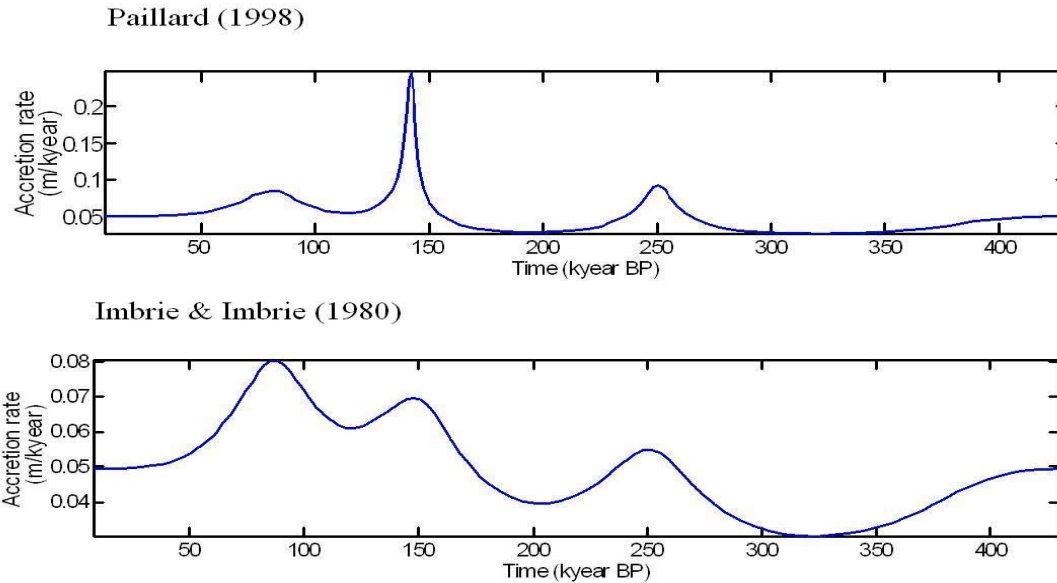
Wat zijn voor iedere dataset- model combinatie de ideale modelparameter waarden?

Wanneer we deze twee onbekenden geschat hebben, kunnen we voor iedere dataset nagaan welk model de variatie het best beschrijft. Door het verschil te analyseren tussen model en meting kan de volgende vraag beantwoord worden.

Welk van de geteste modellen beschrijft de metingen het beste?

Dit bleek voor beide sets het model van Paillard uit 1998 te zijn. Hierbij is er rekening mee gehouden dat een complexer model de variatie in de metingen makkelijker kan volgen door zijn onbekende parameters aan te passen. Hierdoor zal vanaf een gegeven complexiteit niet de fysische onderliggende variatie gemodelleerd worden, maar enkel de toevallige ruisrealisatie.

De tijdsbasis die door het model van Imbrie en Imbrie [1980] en door Paillard [1998] teruggevonden worden, verschillen niet enorm van elkaar. Dit is geïllustreerd in Figuur 2.



**Figuur 2: de sedimentatiesnelheid is weergegeven, berekent met het model van Paillard [1998] en met het model van Imbrie en Imbrie [1980] voor de dataset uit Bassinot et al. [1994]. De maxima en minima vallen ongeveer samen.**

De belangrijkste conclusies die uit deze studie getrokken kunnen worden, zijn dat de ijstijden op Aarde inderdaad door drie toestanden beschreven worden (interglaciale periodes, milde glaciële periodes en diepe glaciële periodes). Om de variatie in de afgelopen 400 kjaar te beschrijven is het niet nodig om de CO<sub>2</sub> concentratie in de atmosfeer expliciet in het model op te nemen, noch om het noordelijke halfrond verschillend te karakteriseren vergeleken met het zuidelijke.

Merk op dat dit niet noodzakelijk betekent dat CO<sub>2</sub> geen invloed heeft op de totale hoeveelheid ijs op Aarde. Dit wil enkel zeggen dat met de huidige meetmethoden de kwaliteit van de observatie niet goed genoeg is om deze nuance aan te brengen in het model. Dit wel doen leidt enkel tot een grotere ruisinvloed op de gemodelleerde waarden.

Dit werk werd uitgevoerd door Fjo De Ridder (FWO postdoctoraal onderzoeker) en Maite Bauwens.

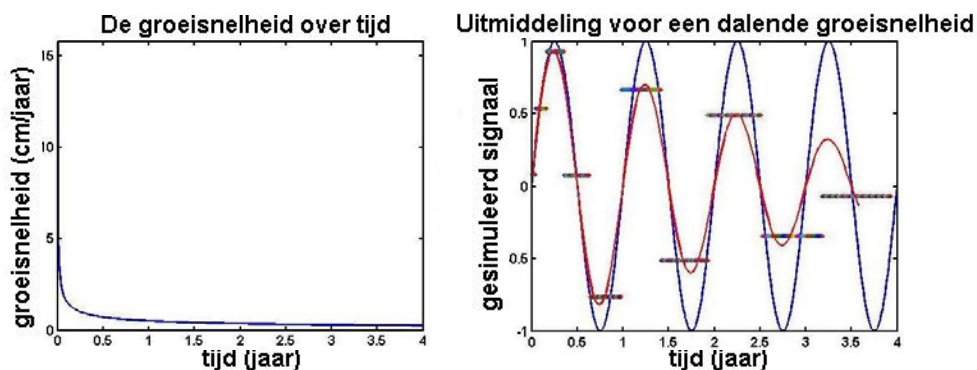
## 2. Eliminatie van systematische fouten

### 2.1 Probleemstelling

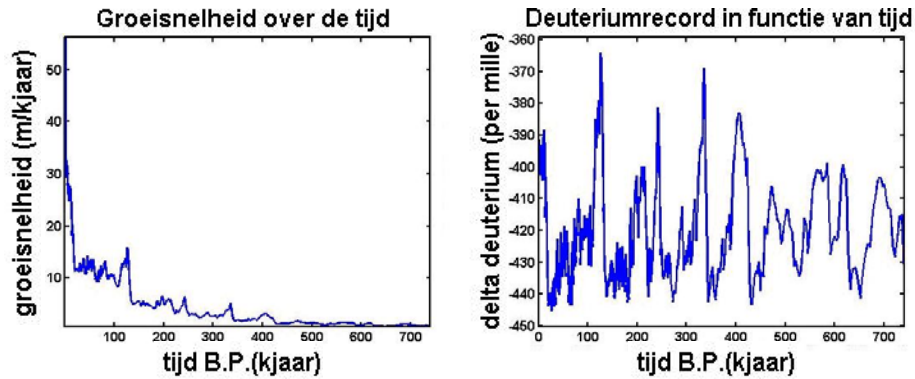
In dit luik van het project wordt een signaalverwerkingsmethode gebouwd m.b.v. typische ELEC technieken om metingen op proxy records te calibreren.

Proxies zijn geïncorporeerd in natuurlijke archieven. Het verwerken van deze archieven, omvat steeds het sampelen van vast substraat. Deze samples hebben een zeker volume, d.w.z. dat één sample een gemiddelde waarde voor alle variatie in het volume zal opleveren. Het volume van het sample werd tot hiertoe verwaarloosd. Dit is enkel toegelaten indien het sample klein is in vergelijking met de variatie die we wensen te reconstrueren. Indien de breedte van het sample echter een aanzienlijk deel van de variatie betreft, zal het signaal uitgemiddeld worden en dus systematisch onderschat worden. In Figuur 3 is dit gesimuleerd: het effect van tijdsuitmiddeling op samples genomen uit een substraat met variërende groeisnelheid wordt getoond. Links wordt de groeisnelheid afgebeeld. Op de rechter figuur stellen de horizontale lijntjes de samplebreedtes voor (merk op dat samples met dezelfde afmetingen op een afstandsschaal, groter worden met een dalende groeisnelheid op een tijdsschaal), het rode signaal is wat we meten en het blauwe signaal is het werkelijke signaal. We zien dat het tijdsuitmiddelingseffect groter is voor lagere groeisnelheden. Zonder een correctie voor de tijdsuitmiddeling lijkt het alsof de amplitude van het signaal daalt met de tijd, terwijl dit in werkelijkheid niet zo is.

In Figuur 4 zien we proxy records van EPICA Dome C, Antarctica (EPICA community members, 2004). Links wordt de aangroeisnelheid van het ijs voorgesteld en rechts de delta deuterium record (proxie voor temperatuur) in functie van tijd. We zien dat de groeisnelheid vanaf 500 kjaar BP (“before present”) heel sterk verminderd is, wanneer we nu naar de amplitude van de deuteriumrecord kijken, zien we dat deze ook verminderd is vanaf 500 kjaar BP. Nu stelt zich de vraag: is dit te wijten aan een verandering in het klimaat of is dit een artefact van de meting?



**Figuur 3: Het uitmiddelingseffect voor dalende groeisnelheid. Links: De groeisnelheid. Rechts: De uitmiddeling, rood : gemeten signaal, blauw: ware signaal, horizontale lijntjes: samples.**



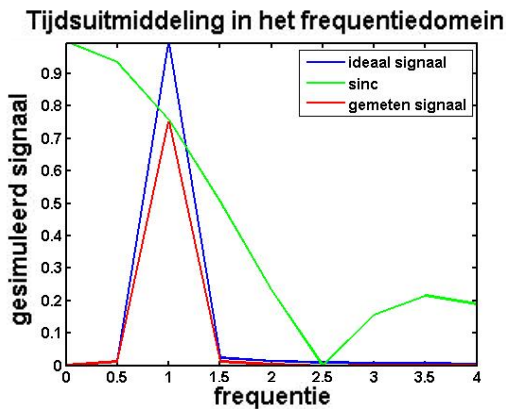
**Figuur 4: EPICA Dome C, Antarctica. Links: de aangroeisnelheid van ijs; Rechts: delta deuterium data.**

## 2.2 Benadering van het probleem

In een eerste benadering veronderstelden we dat het sample een rechthoekig venster had, met twee verwaarloosbare dimensies (hoogte en diepte) en één onverwaarloosbare dimensie (breedte). Typische voorbeelden die hiermee gecalibreerd kunnen worden zijn proxies gemeten in ijskernboringen, calciete substraten (schelpen, koralen, etc...) of tellingen van de vatendensiteit van mangrovebomen.

Het doorgronden van het probleem is gebeurt a.d.v. een simulatie. In Figuur 3, zien we, zoals in de probleemstelling al werd aangehaald, dat de amplitude door uitmidding daalt met een kleiner wordende groeisnelheid, d.w.z met een toenemende frequentie. Uit een onderzoek van de amplitude in functie van de frequentie bleek dat het uitmiddingseffect zich in het frequentiedomein te gedraagt als een filter, t.t.z. als een vermenigvuldiging van het ideale frequentiespectrum met een sincfunctie (de nulpunten komen overeen met de frequenties waarbij het sample exact een periode overlapt). Dit wordt geïllustreerd in Figuur 5. Nu we deze filter gekarakteriseerd hebben, kan een correctie voorgesteld worden. Ruwweg wordt in het frequentiedomein met de inverse van deze filter vermenigvuldigd.

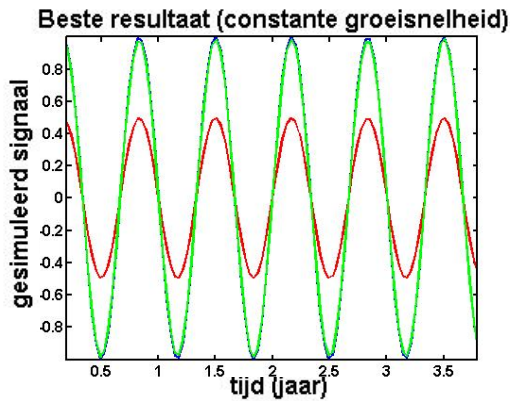
Omdat hoogfrequente componenten door uitmidding bijna compleet verdwijnen, heeft het weinig zin hier nog te corrigeren. Daarom worden het hoogfrequente gedeelte eerst weggefilterd. Dit heeft als bijkomend voordeel dat hier ook een deel van de ruis geëlimineerd.



**Figuur 5: Tijdsuitmidding in het frequentiedomein.**

## 2.3 Resultaten

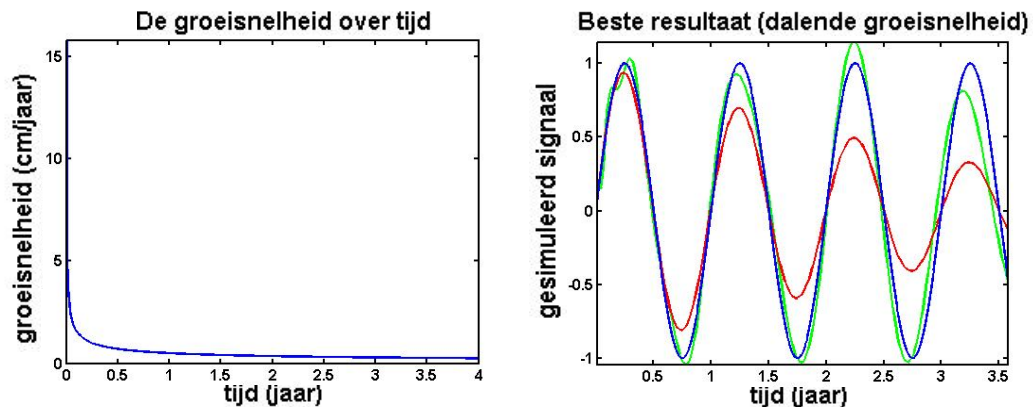
Om de eenvoud te bewaren, werd het probleem in eerste instantie doorgrond door te veronderstellen dat de groeisnelheid constant was (samples met dezelfde afmetingen op de afstandsschaal, hebben dezelfde afmetingen zullen hebben op de tijdsschaal). In Figuur 6 zien we de resultaten voor een sample dat 40% van de periode van het signaal overlapt. Het blauwe signaal is het werkelijke signaal, het rode signaal is het gemeten signaal en het groene signaal is het gecorrigeerde signaal. Na correctie werd meer dan 99.9% van de amplitude teruggevonden, het groene signaal overlapt het blauwe signaal bijna volledig.



**Figuur 6: De resultaten voor 40% overlap voor een constante groeisnelheid.**

Groeisnelheden zijn afhankelijk van omgevingsparameters en zijn dus nooit constant. Om deze reden zijn we vervolgens overgeschakeld naar een simulatie met variërende groeisnelheid (samples met eenzelfde afmeting op een afstandsschaal, worden groter met de dalende groeisnelheid op een tijdsschaal).

In Figuur 7, zien we links de groeisnelheid in functie van de tijd, rechts de resultaten voor een sample dat 40% van de periode van het signaal overlapt. Het blauwe signaal is het werkelijke signaal, het rode signaal is het gemeten signaal en het groene signaal is het gecorrigeerde signaal.



**Figuur 7: De resultaten voor 40% overlap voor een dalende groeisnelheid. Links: groeisnelheid. Rechts: Resultaten.**

## 2.4 Conclusie

De resultaten van deze niet-parametrische aanpak zijn veelbelovend. Nochtans wordt in deze aanpak verondersteld dat de tijdsbasis gekend is, maar dit is niet altijd zo. Om deze reden zullen we in de toekomst het model uitbreiden naar een parametrisch model (zie HOA verlengingsaanvraag).

### 3. Koppeling van multi-proxy archieven aan omgevingsparameters

#### 3.1 Doelstelling

In dit onderzoek willen we de bruikbaarheid van mosselschelpen als omgevingsarchieven uitbereiden.

De voordelen van het gebruik van bivalven als omgevingsarchieven zijn:

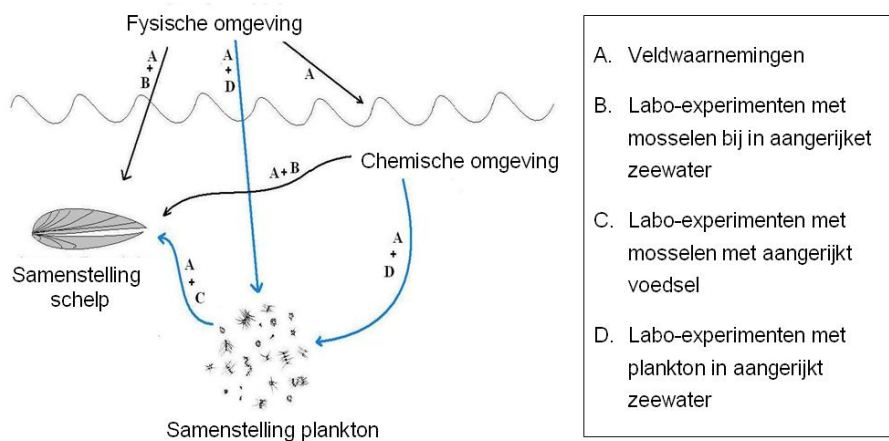
1. hun uitgestrekt areaal (zowel brak als mariene ecosystemen)
2. hun frequent voorkomen in archeologische sites
3. hun snelle groei en dus hoogfrequent archivering

Deze voordelen zorgen voor een groot toepassingspotentieel; zo zal het gebruik van mosselen de reconstructie toelaten van winter-zomer temperatuurschommelingen in de Middeleeuwen. Andere populaire proxies, zoals sedimenten, sponzen etc... kunnen deze intra-annuale variatie niet reconstrueren.

#### 3.2. Probleemstelling

De onderzoeksgroep Analytische en Milieuchemie (ANCH) van de VUB heeft de voorbije 10 jaar een expertise opgebouwd betreffende de klimaatsarchivering in deze mosselschelpen (Vander Putten 1999, Gillikin 2005, De Ridder 2004).

Klassiek wordt ervan uitgegaan dat de chemische en isotopensamenstelling van mosselschelpen rechtstreeks wordt beïnvloed door de fysische en chemische omgevingscondities tijdens het biomineralisatieproces (zie zwarte peilen in Figuur 8).



**Figuur 8: Voorstelling van het oude model (zwart) en het nieuwe model (zwart + blauw)**

Bijgevolg wordt er naar sporenelementen of isotopen gezocht die een lineair verband vertonen met omgevingsparameters. Zo zullen in enkele gevallen  $\delta^{18}\text{O}$  en Mg/Ca-ratio's in de schelp gecorreleerd zijn met temperatuur en saliniteit. Vaak zal de reconstructie op basis van een lineair model echter af te wijken van de reële temperatuur en saliniteit. De vernieuwing die in dit onderzoek wordt voorgesteld

is om het voedsel ook expliciet in rekening te brengen. Naast het chemisch en isotopisch evenwicht met het aquatisch systeem bestaat ook een chemisch en isotopisch evenwicht met het voedsel waarmee de mosselen zich voeden. Door de samenstelling van plankton als een extra component in het model op te nemen zal een biologische component aan het model worden toegevoegd waardoor een meer complex model kan worden opgesteld dat de data beter zal kunnen verklaren (zie blauwe pijlen in figuur 8).

### 3.3. Methodologie

Dit project valt uiteen in 2 fasen luiken:

1. Het verzamelen van data nodig om het model te karakteriseren:
  - a. Regelmatige veldexpedities voor het verzamelen van fytoplankton, mosselen en zeewater in combinatie met het opmeten van een maximaal aantal omgevingsparameters;
  - b. Labo-experimenten met mosselen onder gecontroleerde condities om na te gaan hoe de samenstelling van het zeewater de samenstelling van de mosselschelp beïnvloedt;
  - c. Voedingsexperimenten met mosselen onder gecontroleerde condities om na te gaan hoe de chemische samenstelling van het plankton in de mosselschelp wordt geïncorporeerd;
  - d. Labo-experimenten met plankton om na te gaan hoe omgevingscondities de incorporatie van sporenelementen en isotopen kunnen beïnvloeden;
2. Het opstellen van het model en het identificeren van de parameters
  - a. Het wiskundig uitschrijven van het model dat schematisch is voorgesteld in figuur 8
  - b. Optimiseren van de parameters en een modelselectie doorvoeren om eventuele overbodige parameters te detecteren en te elimineren.

### 3.4. Resultaten en toekomstperspectieven

Op dit ogenblik zijn de veldexpedities (1a) en alle labo-experimenten (1b, 1c en 1d) en in gang gezet. Hiervoor werd voornamelijk in samen gewerkt met de onderzoeksgroep ANCH omwille van hun chemisch-analytische expertise. Van zodra de stalen geanalyseerd zijn, en de Labo-experimenten afgerond zijn zal de focus verschuiven naar het identificeren van de relaties hiervoor zal intens samengewerkt worden met de onderzoeksgroep ELEC omwille van hun identificatie expertise.

Het hele onderzoek wordt uitgevoerd door twee doctoraatstudenten: Fabrice Servaes (IWT-beursaal) en Maite Bauwens (HOA-OZR-beursaal).

## 5. Verbetering van bestaande kennis m.b.t. CO<sub>2</sub> opname door de oceanen

### Optimum Multiparameter analyse voor het bepalen van de bijdragen van mengende watermassa's

Een laatste luik van dit project betreft de Optimum MultiParameter (kortweg OMP) analyse van watermassa's.

De biologische pomp wordt heden duidelijk erkend als één van de centrale processen die de opname van atmosferisch koolstofdioxide door de oceaan bepaalt (bv. Gruber & Sarmiento, 2006; Broecker & Peng, 1998). De algemene doelstelling van dit luik van het project is het kwantificeren van de biologisch ondersteunde oceanische koolstofexportflux uit de oppervlaktelaag en doorheen de waterkolom, ten einde de sequestratie-efficiëntie van de oceanische biopomp nauwkeuriger in te schatten. De OMP analyse wordt in de oceanografische literatuur gebruikt om de bijdragen van verschillende bronwaters in een onderzochte regio te schatten: “Welke fractie van een watersampel, genomen ter hoogte van bvb. Tasmanië, is afkomstig uit de Atlantische oceaan?” Wiskundig gezien betreft het de optimalisatie van een set lineaire mengingsvergelijkingen. Het doel van dit luik was tweeledig. Ten eerste was het de bedoeling dat deze analyse een antwoord kan geven op de vraag of de geobserveerde Bariumverdeling in de Antarctische Oceaan te wijten is aan biologische activiteit of kan verklaard worden door menging van bronwaters met verschillende eigenschappen (het antwoord hierop vindt u verderop in dit verslag). Om dit antwoord zo correct mogelijk te formuleren, was de tweede doelstelling om de huidige OMP methode te verfijnen, o.a. door de meetonzekerheden beter in rekening te nemen en door de invoering van een parametrizatie. In de oorspronkelijke OMP-methodologie wordt de samenstelling van elk gesampelde punt onafhankelijk geoptimaliseerd. Dit wil zeggen dat er geen wiskundige beperking is die oplegt dat de samenstelling van één sampel niet veel mag verschillen van die van het volgende punt, zoals we intuïtief wel aanvoelen. In plaats van de samenstelling in ieder punt apart te bepalen, hebben wij continue basisfuncties gebruikt, waardoor de onderlinge afhankelijkheid van de posities in rekening gebracht kan worden. Dit heeft als extra voordeel dat het effect van de ruis op de metingen gereduceerd wordt, gezien veel minder parameters moeten geschat worden. Deze verfijning maakt het mogelijke om details, die vroeger verscholen zaten in de meetruis te kunnen analyseren. Deze nieuwe methode werd Parametrische OMP, or kortweg POMP, genoemd. Na het zorgvuldig valideren van deze verfijning, werd het op enkele meetsets uit de Antarctische Oceaan toegepast.

Dit onderzoek werd gepresenteerd op meerdere internationale congressen, waaronder de EGU General Assembly in 2005 en de Goldschmidt Conference in 2006. Het werd eveneens aanvaard voor publicatie in Journal of Geophysical Research [de Brauwere et al., in press].

In een volgende (post-doc) stap zal de POMP analyse gebruikt worden om de koolstof opname van oceanen te karakteriseren. Dit onderzoek zal passen in een GOA-project van het departement ANCH.

Dit werk werd uitgevoerd door Anouk de Brauwere (FWO aspirantenmandaat) i.s.m. Fjo De Ridder.

## **Spin-off projecten**

Een belangrijke nevenactiviteit van dit project is het implementeren van de identificatieaanpak in andere omgevingsgerelateerde onderzoeken. Op deze manier hopen we collega-vorsers te kunnen overtuigen van de systematische aanpak die hier voorgesteld wordt. Vier nevenprojecten zijn uitgewerkt.

### **a. Biologische Barium consumptie in de Zuidzee: Identificatie van niet-conservatieve processen**

Na het methodologische werk om de POMP analyse op punt te stellen, moest nog de eerste vraag van dit luik beantwoord worden, namelijk of de oorsprong van de geobserveerde Bariumprofielen in de Antarctische Oceaan biologisch of zuiver fysisch is. Eenmaal de mengingspatronen in het onderzoeksgebied gekend zijn, bijvoorbeeld uitgaande van een POMP analyse, dan kan de theoretische distributie van Barium bepaald worden, onder de veronderstelling dat deze enkel door (fysische) menging veroorzaakt werd. Door deze theoretische reconstructie te vergelijken met de gemeten waarden, kunnen afwijkingen van de “conservativiteitsveronderstelling” gedetecteerd worden. M.a.w. men kan nagaan waar in de oceaan significant meer of minder Barium is dan het geval zou zijn indien Barium enkel door menging werd beïnvloed. Die verschillen kunnen vervolgens geïnterpreteerd worden in termen van verbruik of productie van Barium, hetgeen op zijn beurt kan gelinkt worden aan bepaalde biologische processen.

Het eerste resultaat van deze analyse op enkele datasets in de Antarctische Oceaan is dat het grootste deel van de opgeloste bariumprofielen kan verklaard worden door menging (Jacquet et al, in review). Daarnaast zijn wel enkele zones gedetecteerd waar het gemeten opgelost barium significant lager is dan verwacht in geval van afwezigheid van biologische processen. Bovendien komen die zones overeen met eerder waargenomen verhoogde particulaire bariumconcentraties. Deze resultaten bevestigen de hypothese dat opgelost barium wordt omgezet in particulier barium bij de vorming van aggregaten van organisch detritus in de sub-oppervlaktelaag.

Deze resultaten werden verkregen door Stéphanie Jacquet i.s.m. Anouk de Brauwere en Fjo De Ridder en werden opgestuurd naar Geophysical Research Letters.

### **b. Modeleren van een ecologisch systeem**

Een onderzoeksdomein van ANCH is het bestuderen van de ecologische toestand van onze rivieren. Als onderzoeksgebied is hier gekozen voor de Aa rivier. De toestand van de rivier kan gevolgd worden door het monitoren van omgevingsparameters zoals nutriënten, zuurstof, koolstofdioxide, ... Deze parameters verschaffen op een indirecte manier informatie over de biogeochemische dynamiek

van het systeem. Een efficiënte manier om de gezondheid van een ecosysteem na te gaan is via de opgeloste zuurstof, omdat deze variabele de fotosynthese en de respiratiesnelheden weerspiegelt.

Op twee stations, 1 km van elkaar gescheiden werd gedurende 1 dag om de 2h een water monster geanalyseerd in de maanden maart, mei, juli en september.

Een complicatie voor deze rivier is dat een grote hoeveelheid zuurstof het systeem binnenstroomt vanuit hoger gelegen gebieden en dat een grote fractie hiervan het ecosysteem weer uitstroomt, zonder te interageren met het ecosysteem. Om een onderscheid te kunnen maken tussen de zuurstof die door het ecosysteem getransporteerd wordt en de zuurstof die geproduceerd/geconsumeerd wordt, zijn we uitgegaan van een bestaand model dat enkel het laatste proces adequaat beschrijft. Door de randvoorwaarden van deze differentiaal vergelijking te koppelen aan de metingen van het eerste station kan de zuurstofinvoer in rekening gebracht worden. Dit model bevat dan nog drie onbekende parameters. De eerste beschrijft de zuurstof productie, de tweede de consumptie en de derde de uitwisseling van zuurstof met de atmosfeer. Door vervolgens dit model te fitten op de zuurstofconcentratie die het systeem verlaat, kunnen we de drie karakteristieken van het ecosysteem kwantifiëren. Het bleek dat de modelparameters gevoelig waren voor de integratiemethode en optimalisatiemethoden die gebruikt werden. Daarom is hier in het bijzonder aandacht aan besteed.

De resultaten toonden aan dat de precisie proportioneel toenam met de fotosynthetische activiteit, terwijl de accuratesse net afnam. De reden hiervoor is dat wanneer het systeem veel zuurstof produceert, de uitwisseling met de atmosfeer niet meer bij chemisch evenwicht gebeurt. Dit effect was niet in rekening gebracht en veroorzaakt een modelfout bij hoge concentraties. Wanneer er weinig zuurstof geproduceerd werd, is dit effect verwaarloosbaar.

De Aa rivier wordt gedomineerd door respiratie. Dit betekent dat dit deel van de rivier gemiddeld meer zuurstof verbruikt dan het kan produceren. Dit is mogelijk omdat zuurstof van stroomopwaarts geïmporteerd wordt. Enkel in juli, wanneer de productie piekt, zijn respiratie en productie van vergelijkbare grootte.

Dit werk werd uitgevoerd door Loreto De Brabandere en Adi Nugraha i.s.m. Fjo De Ridder [Nugraha, 2006]. Onze voornaamste bijdrage was het schrijven van de optimalisatieroutines om de parameters zo accuraat en precies mogelijk te schatten. Een uitgebreid verslag kan teruggevonden worden in de thesis van Adi. Deze resultaten zullen gebundeld worden in een artikel.

## **b. Koolstof koppelen aan bodemgebruik en –type**

In deze studie wordt de opslag capaciteit van organische koolstof in de bodem (SOC) in Vlaanderen onderzocht. Hiervoor hebben we een model ontwikkeld dat de verdeling van SOC in functie van de diepte weergeeft. Dit laat een vergelijking van de opslag tussen twee verschillende groepen (bodemgebruik - bodem klasse) in functie van de diepte toe.

Daarnaast kan dit kader aangewend worden om binnen een zelfde groep (bodemgebruik – bodemtype klasse) de tijdsevolutie in SOC te evalueren.

Enerzijds beschikken we over de ruwe data en anderzijds willen we deze in verband brengen met een aantal fysische variabelen, zoals de ploegdiepte (bodemgebruik), het grondwaterpeil en het bodemtype. Het ontwikkelde model bestaat uit drie parameters. Ieder van deze modelparameters hopen we linken aan een fysische variabele, zodat we voorspellingen kunnen maken over de verandering in SOC capaciteit, wanneer het bodemgebruik gewijzigd wordt:

1. Welke invloed heeft drainage op de koolstofhuishouding?
2. Welke invloed heeft conversie van bodemgebruik tot gevolg: bvb. van bosland naar weiland, naar akkerland?

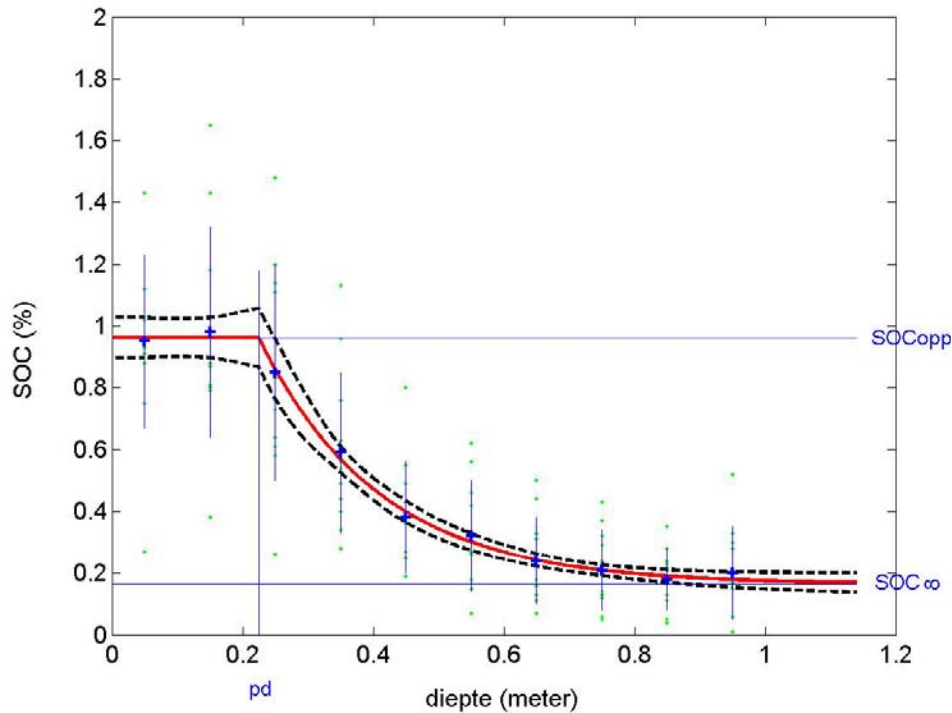
Omdat de hoeveelheid koolstof in de bodem enorm is, kunnen deze effecten een grote invloed hebben het koolstofmanagement voor Vlaanderen.

De bedoeling van deze samenwerking is het ontwikkelen van algoritmes die de parametertransformatie kunnen automatiseren en zo de grote database “Aardewerk” en eigen metingen kunnen omzetten in direct bruikbare en nuttige informatie.

Uit deze studie blijkt een belangrijk verschil te bestaan in SOC diepteverdeling tussen de ploeglaag en de onderliggende bodem. In de ploeglaag blijkt de koolstofconcentratie ongeveer constant te blijven (zie bvb. Figuur 9). In de bodem onder de ploegdiepte, (vrijwaard van fysische verstoring door het toedoen van de mens), vertoont het SOC gehalte duidelijk een exponentieel afnemende trend met de diepte. Deze afname convergeert opnieuw naar een constante waarde, die gerelateerd kan worden aan het grondwaterpeil. Om de fysische variabelen te kwantificeren is een gewogen kleinste kwadraten schatter gebouwd. Enkel de ploegdiepte kan hiermee niet nauwkeurig geschat worden en daarom is hiervoor een alternatieve methode bedacht, gebaseerd op informatie criteria [De Ridder et al., 2005].

In figuur 9 wordt de toepassing van het model op een SOC dataset geïllustreerd. De dataset bestaat uit 110 stalen komende van 11 boringen, willekeurig verspreid over Vlaanderen, genomen onder droge lemige akkerland bodems, met een bemonstering om de 10 cm tot op 1 meter diepte. Opmerkelijk is het feit dat ondanks de behoorlijk grote standaardafwijking op de metingen per diepte de gemiddelde waardes per diepte, over de 11 boringen heen zeer nauw aansluiten bij het gefitte systeem. Dit betekent dat het verschil tussen metingen en model grotendeels door stochastische effecten kan verklaard worden en niet te wijten is aan systematische fouten. Mede hierdoor zijn de berekende fouten op de geschatte parameters en de onzekerheidsband rond curve relatief klein. In dit voorbeeld

wordt de ploegdiepte geschat op  $0,229 \pm 0,032$  meter. Voor SOC<sub>opp</sub> en SOC<sub>∞</sub> vinden we respectievelijk  $0,962 \pm 0,065$  % en  $0,164 \pm 0,032$  %.



**Figuur 9: applicatie van het model op een droge lemige akkerland (pd: ploegdiepte, ‘.’ Stalen, ‘+’ gemiddelde, volle rode lijn: model, stippenlijn: 1σ model onzekerheid).**

De vorm van het model en de parameterwaarden verschillen in functie van het bodemgebruik en/of bodemtype. Zo zal onder weiland en bos, te wijten aan de afwezigheid van een ploeglaag, de SOC verdeling in het volledige diepte profiel beschreven kunnen worden aan de hand van een exponentiële functie

In de toekomst zal onderzoek gevoerd worden naar de fysische betekenis van de parameters. Teneinde de parameterwaarde uit te drukken in functie van en een aantal site variabele die het bodemtype kwantificeren (%zand, %leem, %klei, diepte grondwatertafel,...) zal de relatie tussen beide in detail bestudeerd worden.

Steunend op dit model kan de SOC opslag ( $\text{kg}/\text{m}^2$ ) berekenen worden op willekeurige referentie diepte. Dit stelt ons in staat, vertrekkende van het model en bodemgebruik/type kaart, een 3D visualisatie van de ruimtelijke spreiding van SOC in een regio of land te maken. Hiermee wordt een stap (één dimensie) verder gegaan dan de traditionele studies waarin de ruimtelijke spreiding van SOC tot op een vaste referentie diepte in kaart (2D) werd gebracht.

Dit werk werd uitgevoerd door Jeroen Meersmans (DGGF; IWT beursaal) i.s.m. Fjo De Ridder. Een eerste studie, die de geografische spreiding modelleert is momenteel “in review” [Meersmans et al., in

review]. Een tweede publicatie, die het model voor de diepteverdeling gebruikt is momenteel in voorbereiding.

#### **d. Bio-informatica: Fur-gereguleerde genen in *Pseudomonas* identificeren**

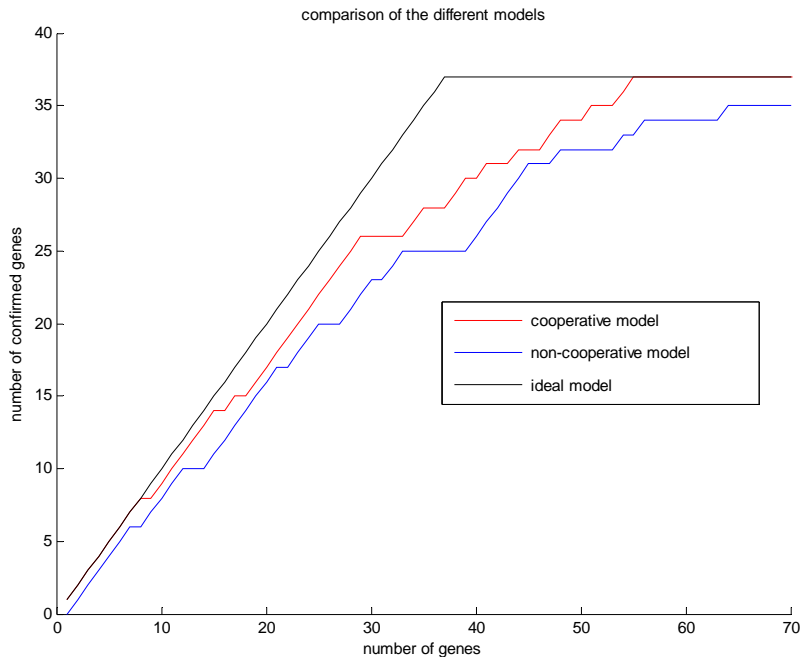
Liesbeth van Oeffelen was student elektrotechnisch ingenieur. Geboeid door genetica wou zij graag een afstudeerwerk maken in deze richting. Daarop hebben we besloten haar hierin te begeleiden. Er is gekozen voor een samenwerking met Prof. Pierre Cornelis.

*Pseudomonas aeruginosa* is een pathogene bacterie die infecties veroorzaakt bij mensen met een aangetaste immuniteit zoals bv. muco-patiënten. Ijzerlimitatie vormt hier een belangrijk signaal om de expressie van virulentiefactoren op te drijven. Daarom zou de regulator aan de basis van de controle uitgeoefend door ijzer op ijzergereguleerde genen een interessant doelwit kunnen zijn voor de ontwikkeling van medicijnen. In *P. aeruginosa* is deze regulator de ijzeropname regulator, met als Engelse afkorting Fur.

Het doel van dit werk is het identificeren van de genen die gereguleerd worden door Fur. Dit in eerste instantie voor *P. aeruginosa*, maar ook voor andere soorten *Pseudomonas*. Hiertoe dient een predicatieve methode opgesteld te worden om genen te rangschikken volgens de kans dat ze gereguleerd worden, bepaald op basis van een set gealigneerde sequenties afkomstig uit een SELEX experiment. Aangezien coöperatieve proteïne-proteïne interacties een belangrijke rol spelen in DNA-herkenning door Fur, is in dit werk de keuze gemaakt om een fysisch model te implementeren dat coöperatieve binding modelleert. Daarom wordt een wiskundige uitdrukking afgeleid voor de bindingskansen van een DNA sequentie in aanwezigheid van coöperatief bindende proteïnen.

Om de nieuwe predictiemethode te vergelijken met de predictiemethode die gebruik maakt van het niet-coöperatieve model, werden beide methodes geïmplementeerd in MATLAB en gevalideerd a.d.h.v. de SELEX data en microarray analyses. De kwaliteit van de methoden wordt gemeten op basis van de verdeling van de posities van de geconfirmeerde genen in de rangschikking. Hieruit blijkt dat het coöperatieve model het beste presteert.

Dit is geïllustreerd in Figuur 10, waar in het zwart het ideale geval is weergegeven (in de veronderstelling dat er 37 gereguleerde genen zijn). Hiermee zouden alle gereguleerde genen gerangschikt worden voor de niet-gereguleerde. Hoe meer de curve afwijkt van dit ideale geval, hoe minder goed de gereguleerde genen van het niet-gereguleerde kunnen onderscheiden worden. Hier kan duidelijk afgelezen worden dat het coöperatieve model beter werkt dan het niet-coöperatieve.



**Figuur 10: vergelijking van de performantie van de verschillend predictiemodellen voor Fur.**

Het oorspronkelijke model was in staat om 11 van de 25 genen te identificeren. Het verfijnde algoritme kon 22 van de 25 genen identificeren.

Ten slotte werd de nieuwe predictiemethode toegepast op de verschillende andere soorten *Pseudomonas*. De hoogst scorende genen werden getabelleerd en kunnen beschouwd als goede kandidaten om experimenteel gevalideerd te worden.

Dit werk is uitgevoerd door Liesbeth Van Oeffelen in samenwerking met Prof. Pierre Cornelis, Prof. Johan Schoukens en Prof. Rik Pintelon en Fjo De Ridder [Van Oeffelen, 2006]. Momenteel bereidt Liesbeth een doctoraat voor in een gespecialiseerde groep bio-informatici aan de KUL.

## Externe middelen

Er zijn verschillende externe middelen aangevraagd om de instandhouding van dit netwerk op termijn te verzekeren:

- ✓ Mandaat postdoctoraal onderzoeker van het FWO-Vlaanderen (A 4/5 A/V. – C175) — 1.10.2005-30.9.2008; Titularis: Fjo De Ridder.
- ✓ Mariene biogene carbonaten als archieven van klimaatsverandering: een kritische evaluatie (CALMARS II) - DWTC: SD/CS/02A — 15.03.2006-14.12.2007; Promotor: Frank Dehairs.
- ✓ IWT aspiranten mandaat (projectnummer SB-61205) — 01.01.2007-31.12.2008; Titularis: Fabrice Servaes; Promotor: Frank Dehairs.

In parallel met de eerste aanvraag zijn de volgende projecten aangevraagd en gefinancierd:

- ✓ EUROCEANS (FP6 Network of Excellence) EUXX -- 01.01.2005-31.12.2008; (ANCH, ELEC)
- ✓ PaleoSalt FWO- ESF-EUROCORES-EUROCLIMATEG.0642.05 01.01.2005-31.12.2007 (ANCH-ELEC-GEOL)
- ✓ FWO aspirantenmandaat voor Anouk de Brauwere (01/10/2003-30/9/2008)

## Publicaties voortkomend uit dit interdisciplinaire project

### *Milieu*

1. W. Baeyens, de Brauwere A., Brion N., De Gieter M. and Leermakers M. “Arsenic speciation in the River Zenne”, Belgium. In review, Science of the Total Environment.

### *Klimaat reconstructie*

2. F. De Ridder, A. de Brauwere, R. Pintelon, J. Schoukens, F. Dehairs, W. Baeyens, B.H. Wilkinson, “Comment on: Paleoclimatic inference from stable isotope profiles of accretionary biogenic hardparts—a quantitative approach to the evaluation of incomplete data, by Wilkinson, B.H., Ivany, L.C., 2002. Palaeogeogr. Palaeocl. Palaeoecol. 185, 95–114”, Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology (in press).
3. F. De Ridder, de Brauwere A., Pintelon R., Schoukens J. and Dehairs F. Identification of the accretion rate for annually resolved archives”, In review, Biogeosciences.

### *Oceanologie*

4. M. Elskens, Baeyens W., Brion N., De Galan S., Goeyens L. and de Brauwere A., “Reliability of N flux rates estimated from <sup>15</sup>N enrichment and dilution experiments in aquatic systems”, Global Biogeochemical Cycles 19, GB4028, doi:10.1029/2004GB002332., 2005, Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology (in press).
5. A. de Brauwere, Jacquet S.H.M., De Ridder F., Dehairs, F., Pintelon R., Schoukens J. and Baeyens W., “Water mass distributions in the Southern Ocean derived from a parametric analysis of mixing water masses”, In press, Journal of Geophysical Research.
6. S.H.M. Jacquet, de Brauwere A., De Ridder F. and Dehairs F. “Investigating dissolved barium behavior in the Southern Ocean using a parametric mixing model”, In review, Geophysical Research Letters.
7. M. Elskens, Corvaisier R., Beucher C., Savoye N., Treguer P., de Brauwere A. and Baeyens W., “Statistical process control in assessing production and dissolution rates of biogenic silica in marine environments”, In review, Marine Chemistry.

### *Geografie*

8. J. Meersmans, F. De Ridder; F. Canters en M. Van Molle, “A multiple regression approach to assess the spatial distribution of Soil Organic Carbon (SOC) at the regional scale (Flanders, Belgium)”, Submitted to Geoderma.

## Presentaties

### *Fjo De Ridder*

- Mei 2006: ANCH talk<sup>1</sup>, Brussel(mondelinge presentatie)
- Juni 2006: ANCH talk,Brussel(mondelinge presentatie)
- Juni 2006: 26th IUGG Conference on Mathematical Geophysics, Sea of Galilee, Israël  
(mondelinge presentatie)
- Juni 2006: 20 Years of Nonlinear Dynamics in Geosciences Conference, Rhodos,  
Griekenland (mondelinge presentatie)
- Augustus 2006: Goldschmidt Conference, Melbourne, Australië (mondelinge presentatie)

### *Anouk de Brauwere*

- maart 2006: VLIZ Young Scientists' Day, Brugge, Belgium (deelneemster)
- Juli 2006: SCAR Open Science Conference, Hobart, Australia (deelneemster)
- Augustus 2006: Goldschmidt Conference, Melbourne, Australia (mondelinge presentatie)
- Oktober 2006: 20th Dissertation Symposium on Chemical Oceanography (DISCO XX),  
Honolulu, USA, (mondelinge presentatie)
- Februari 2007: 14th National AMOS Conference, Adelaide, Australia (mondelinge  
presentatie)

### *Maite Bauwens*

- Maart 2006: VLIZ-jongierendag, Brugge (poster presentatie)
- Februari 2006 ICCoS workshop, Brussel (deelneemster)
- April 2006: EGU General Assembly, Vienna, Austria(poster presentatie)
- Mei 2006: PaleoSalt meeting, Brussel (deelneemster)
- November 2006: Biomineralisation Workshop, Grenoble, Frankrijk(poster presentatie)
- Januari 2007 ANCH talk, Brussel (mondeling voordracht)
- February 2007 CALMARS II meeting, Brussel  
(poster presentatie)

---

<sup>1</sup> De “Thursday ANCH talks” zijn een wekelijks initiatief dat we (Anouk de Brauwere) organiseren in de vakgroep ANCH om 1. de cohesie binnen de groep te verbeteren, 2. de studenten te trainen in presentaties en discussies en 3. om een forum te bieden waar wetenschappelijke problemen en projecten “low profile” bediscussieerd kunnen worden. Ondertussen zijn hier al meer dan 32 presentaties gegeven.

### *Veerle Beelaerts*

- Februari 2006: ICCoS workshop, Brussels (deelneemster)
- Maart 2006: VLIZ-jongeredag, Brugge (poster presentatie)
- April 2006: EGU General Assembly, Wenen, Oostenrijk (poster presentatie)
- Mei 2006: Paleosalt Kick-off meeting, Brussel (mondelinge presentatie)
- Juni 2006: ANCH talk, Brussel (mondelinge presentatie)
- Juni 2006: CALMARS II Kick-off meeting, Brussel (mondelinge presentatie)
- Oktober 2006: IAP study day, Leuven (deelneemster)
- December 2006: ICCoS workshop, Leuven (deelneemster)

### *Fabrice Servaes*

- Mei 2006: Paleosalt Kick-off meeting, Brussel (deelnemer)
- November 2006: Biomineralisation Workshop, Grenoble, Frankrijk (poster presentatie)
- December 2006: ANCH talk, Brussel (mondelinge presentatie)

## Referenties

F.C. Bassinot, Labeyrie L.D., Vincent E., Quideleur X., Shackleton N.J., Lancelot Y., “The astronomical theory of climate and the age of the Brunhes-Matuyama magnetic reversal”, *Earth and Planetary Sciences Letters* 126, 91-108, 1994.

W.S. Broecker and Peng T.H., *Greenhouse Puzzles*, Eldigio Press, 1998.

F. De Ridder, Pintelon R., Schoukens J. and Gillikin D.P., “Modified AIC and MDL model selection criteria for short data records”, *IEEE transactions on instrumentation and measurements*, 54 (1), 144-150, 2005.

F. De Ridder, “Identification of the time base in environmental archives.”, Ph.D. Thesis, Vrije Universiteit Brussel, Belgium, 244 p., 2004

J. Imbrie, Imbrie J.Z., "Modeling the climatic response to orbital variations", *Science* 207, 943-953, 1980.

D.P. Gillikin, “Geochemistry of Marine Bivalve Shells: the potential for paleoenvironmental reconstruction.”, Ph.D. thesis. Vrije Universiteit Brussel, Belgium, 258 p., 2005.

A. Nugraha. Modelling of oxygen production and consumption in a small river colonized by Macrophytes. M.Sc. thesis Vrije Universiteit Brussel, Belgium. Promoter: F. De Ridder; Co-promoter: F. Dehairs, 2006.

D. Paillard, "The timing of Pleistocene glaciations from a simple multiple-state climate model", *Nature* 391, 378-381, 1998.

D. Paillard, Parrenin F., "The Antarctic ice sheet and the triggering of deglaciations", *Earth and planetary science letters* 227, 263-271, 2004.

F. Parrenin, Paillard D., "Amplitude and phase of glacial cycles from a conceptual model", *Earth and planetary science letters* 214, 243-250, 2003.

J.L. Sarmiento and Gruber N., *Ocean biogeochemical dynamics*, Princeton University Press, 2006.

E. Vander Putten, Dehairs F., Andre L., Bayens, W Quantitative in situ microanalysis of trace elements in calcite using infrared laser ablation – inductive coupled plasma mass spectrometry: a critical evaluation, *Analitica Chemica Acta* 378, 261-272, 1999

L. Van Oeffelen. Identification of Fur-regulated genes in *Pseudomonas*. M.Sc. thesis Vrije Universiteit Brussel, Belgium. Promotor: J. Schoukens; Co-promotor: P. Cornelis, 2006.

C. Waelbroeck, Labeyrie L., Michel E., Duplessy J.C., McManus J.F., Lambeck K., Balbon E., Labracherie M., “Sea-level and deep water temperature changes derived from benthic foraminifera isotopic records”, *Quaternary Science Reviews* 21, 295-305, 2002.