

DEELTJESMODELLEN

(tweedimensionaal-horizontaal)

G.C. van Dam

Nota FA 8507 *)

Rijkswaterstaat, Directie Waterhuis-
houding en Waterbeweging, Fysische
Afdeling

*) Op enkele korrekties na komt deze
nota overeen met de gelijknamige
bijdrage aan de Vervolgkursus WAQUA
deel Waterkwaliteit (19 en 20 sept.
1985)

Voor een volledige syllabus van deze
kursus wende men zich tot ir. A. Roos

DEELTJESMODELLEN (2DH)

Inhoudsoverzicht	blz.
1. <u>Inleiding</u>	1
1.1. ... 1.4. zonder titel	
2. <u>Deeltjesverplaatsingen onder invloed van snelheidsvelden die afgeleid zijn uit op roosters gegeven componenten</u>	4
3. <u>Aanvulling door additionele snelheidsvelden of andere mechanismen</u>	8
3.1. <u>Random-verplaatsingen</u>	8
3.2. <u>Kunstmatige velden</u>	10
3.3. <u>Invloed diepteverschillen</u>	11
3.3.1. Bij kunstmatige velden	12
3.3.2. Bij random technieken	13
4. <u>Nauwkeurigheid en rekentijden</u>	17
4.1. ... 4.4. zonder titel	
4.5. <u>Tijdstap en rekenschema</u>	18
4.5.1. Tijdstap en snelheidsveld	18
4.5.2. Tijdstap en random-verplaatsing	19
4.5.3. Tijdstap en maaswijdte van gegeven rooster	20
4.6. <u>Nauwkeurigheid en deeltjesaantal</u>	21
4.7. <u>Rekentijd</u>	22
4.8. <u>Speciale technieken ter verkorting van rekentijden</u>	24
4.8.1. ... 4.8.7. zonder titel	
5. <u>Randbehandeling</u>	27
5.1. <u>Gesloten randen</u>	27
5.2. <u>Open randen</u>	29
5.3. <u>Bronnen</u>	29
6. <u>Afregeling</u>	30
7. <u>Afbraak en reacties</u>	30
8. <u>Nabewerking en presentatie</u>	31
9. <u>Literatuur</u>	31
Figuren	35 e.v.

D E E L T J E S M O D E L L E N (2DH)

G.C. van Dam

1. Inleiding

1.1. In aansluiting op eindige-differentie-waterbewegingsmodellen, zoals het waterbewegingsdeel van WAQUA, kan men in plaats van een e.d.-transportmodel ook een model gebruiken gebaseerd op de verplaatsingen van deeltjes. Met het woord deeltjes geven we entiteiten aan die in de berekening géén afmetingen hebben, dus b.v. in een (x,y)-model geen afmeting in x- of y-richting. Of we ze beschouwen als representanten van grotere brokken materie is meer een interpretatiekwestie. Bij het bewerken na de eigenlijke transportberekening kan deze interpretatie overigens wel meewegen in de keuze van de bewerkingen.

Met een deeltjesmodel kunnen we structuren weergeven die kleiner zijn dan de maaswijdte van het gegeven waterbewegingsmodel. Dit kan met een e.d.-transportmodel ook als we daarin een kleinere maas kiezen dan die van het w.b.m. Dit lijkt meer omslachtig, maar bepaalde problemen die zich bij een e.d.-transportmodel op verfijnd rooster zouden voordoen, moeten bij sommige toepassingen van deeltjesmodellen ook worden opgelost (zie i.h.b. par. 2).

Uitgaande van een w.b.m. als gegeven, wordt in een deeltjesmodel géén verfijning van de bodemschematisatie ingevoerd, alleen een interpolatie. Subgrid-details van de bodemtopografie en effecten die daarvan het gevolg zijn worden hoogstens op statistische wijze verdiskonteerd. Dit is toch winst, mits men deze en andere statistische effecten door middel van parameters kan afregelen aan de hand van meetgegevens. Bovendien kunnen bepaalde subgrid-structuren met een deterministisch karakter ook rechtstreeks voortvloeien uit grootschalige gegevens, m.a.w. alleen de mogelijkheid om ze met een andere modeltechniek zichtbaar te maken is voldoende. Dit slaat op structuren die bij continue lozingen ontstaan louter als gevolg van de tijdafhankelijkheid van het snelheidsveld. Dit werd o.m. al geïllustreerd in de dissertatie van Maier-Reimer¹⁶ in 1973 (figuur 1). Ruimtelijk kan het snelheidsveld in dit voorbeeld uit praktisch

oogpunt gevoeglijk als uniform beschouwd worden. Een ander voorbeeld wordt gegeven in figuur 2.

Behalve het oplossend vermogen, bereikt op een simpele wijze, wordt als voordeel van deeltjessimulatie wel genoemd de relatieve eenvoud van de numerieke problematiek. Voorzover het de eigenlijke transportberekening betreft, d.w.z. wanneer we uitgaan van een continu snelheidsveld, afgeleid uit een gegeven snelheidsmatrix, beperkt het numerieke aspekt zich inderdaad tot het kiezen van voldoende kleine tijdstappen en het eventueel toepassen van een hogere-orde-rekenschema voor het oplossen van

$$\vec{r}_d(t_2) = \vec{r}_d(t_1) + \int_{t_1}^{t_2} \vec{v}_d(t) dt \quad (1)$$

waarin $v_d(t)$ de ("Lagrangiaanse") snelheid van het beschouwde deeltje is, die op elk moment gelijk is aan de lokale ("Eulerse") snelheid van het gegeven veld

$$\vec{v}_d(t) = \vec{v}_E \left\{ \vec{r}_d(t), t \right\} \quad (2)$$

1.2. Wanneer er géén terugkoppeling is van de materie waarvan het transport wordt beschouwd, naar de waterbeweging, zal men in het algemeen ontkoppeld werken, d.w.z. snelheidsmatrices (c.q. koëfficiëntenmatrices die in combinatie met een rekenvoorschrift het snelheidsveld vastleggen) opslaan in een geheugen, zodat men met hetzelfde snelheidsveld zo veel transportberekeningen kan uitvoeren als gewenst (bij veranderlijke velden worden de matrices vastgelegd voor een aantal diskrete tijdniveaux). De mogelijkheid van ontkoppeling is niet specifiek voor deeltjesmodellen en wordt de laatste jaren ook steeds meer toegepast bij andere transportmodellen.

Er zal in het onderstaande niet nader ingegaan worden op mogelijke terugkoppeling naar de waterbeweging. In dit opzicht zijn de te beschouwen deeltjes dus passief. Verder beperken we ons tot het geval dat de deeltjes ook passief zijn in de zin dat ze de waterbeweging volledig volgen, dus bij voorbeeld niet bezinken.

1.3. Een systematisch overzicht van voor- en nadelen van deel-

tjessimulatie is nog moeilijk te geven, omdat dit deels een kwestie is van ervaring. De ervaring met deeltjesmodellen bij de Waterstaat en elders in Nederland is nog zeer beperkt. De gebruikte programma's zijn in feite allemaal nog experimenteel. Bij de Rijkswaterstaat betreft het uitsluitend tweedimensionaal-horizontale modellen, aansluitend op 2DH-waterbewegingsmodellen. Bij het KNMI (Riepma²⁰) bestaat enige 3D-ervaring, echter niet in relatie tot 3D-waterbewegingsmodellen, maar geënt op meetresultaten gekombineerd met analytische benaderingen (o.a. "Van Veen-vertikalen"). Mede gezien de kontekst, een WAQUA-kursus, zullen we ons tot het 2DH-geval beperken.

Deze beperking kan voor het deeltjestransport nog worden onderverdeeld in twee gevallen. Het eerste betreft het geval dat "zuiver" 2D kan worden gewerkt, wat o.m. inhoudt dat er geen wezenlijk onderscheid wordt gemaakt tussen tweedimensionale en driedimensionale concentraties. De laatste worden dan uit de eerste verkregen door deling door de gemiddelde waterdiepte van het beschouwde gebied. Dit is uiteraard alleen aanvaardbaar als de verschillen in waterdiepte in plaats en tijd niet te groot zijn. Hiervan wordt in sommige gebieden van de Noordzee wel voldaan. Zowel de nauwkeurigheidseisen als de nauwkeurigheid van het model dienen hierbij te worden meegewogen. Als men van de berekende concentraties geen grotere nauwkeurigheid vereist of van het model mag verwachten dan 30%, heeft het weinig zin waterdiepteverschillen van maximaal 20% in rekening te brengen. In de buurt van kusten gaat de 2D-benadering echter al gauw grotere afwijkingen geven en in estuaria is hij beslist onvoldoende. Ook in een afgesloten gebied als het IJsselmeer, met in het inwendige toch ook nog waterdiepteverschillen van een faktor 2 à 3, beperken de afwijkingen bij een 2D-benadering zich niet tot enkele tientallen procenten.

1.4. Het in rekening brengen van de derde dimensie bestaat niet alleen uit het gebruiken van de plaatselijke (en momentane) waterdiepte bij het vertalen van de tweedimensionale concentratie in een driedimensionale. Dan zou het te allen tijde een zeer eenvoudige zaak zijn. De waterdiepteverschillen moeten ook tijdens de transportberekening verdisconteerd worden. Wat betreft het snelheidsveld gebeurt dit in principe "automatisch", want bij de

berekening daarvan is de waterdiepte voortdurend meegenomen, o.m. in de continuïteitsvergelijking. Als de continuïteitsvergelijking bij het interpoleren van de snelheden niet te veel geweld is aangedaan (zie paragraaf 2), mag men vanuit deze hoek geen al te grote problemen verwachten. Om realistische deeltjesverdelingen te krijgen is het toepassen van de gegeven (c.q. geïnterpoleerde) snelheidsvelden echter niet voldoende. Het daaraan ontbrekende "subgrid"-deel blijkt voor een goede weergave van verspreidingsprocessen bijna altijd een essentiële rol te spelen indien men niet uitsluitend "grootschalig" bezig is. Onder "subgrid" verstaan we in dit verband alles wat in het beschikbare 2D-snelheidsveld ontbreekt, dus ook 3D-aspekten zoals snelheidsverschillen over de vertikaal. Wat in het gegeven 2D-snelheidsveld ontbreekt en een rol speelt in het verspreidingsproces wordt "gesuppleerd" in de vorm van een aanvullend snelheidsveld of ander mechanisme. Heeft deze suppletie een zuiver tweedimensionaal karakter, dan kan dit als de waterdiepteverschillen niet klein zijn, aanleiding geven tot niet-verwaarloosbare fouten. Deze kwestie is vooral van belang in stationaire situaties (zie paragraaf 3.3).

2. Deeltjesverplaatsingen onder invloed van snelheidsvelden die afgeleid zijn uit de op roosters gegeven componenten

Er wordt gesproken van "afgeleid", omdat het niet een kwestie is van louter interpoleren. Men zal in het algemeen ook moeten letten op bepaalde nevenvoorwaarden, met name de continuïteit van de vloeistof. In ieder geval moet men zich afvragen wat het gevolg kan zijn als men zich beperkt tot een puur wiskundige interpolatiemethode. Er wordt gesproken van "componenten", omdat de snelheidscomponenten in x- en y-richting bij modellen als WAQUA in eerste instantie niet in dezelfde punten beschikbaar komen, zodat men niet zonder meer beschikt over één matrix van snelheidsvectoren (c.q. per tijdsniveau).

In de praktijk is het wel zo gegaan dat begonnen is met louter interpoleren, zonder te kijken of de behoudswetten die bij de waterbewegingsberekening uiteraard streng waren opgelegd, bij het interpoleren niet te veel geweld werd aangedaan. Deze vraag is alleen

van belang voorzover de afwijkingen ook merkbare effecten hebben op deeltjesdistributies. Dit hangt er weer van af of men (naar de plaats) met vlakke of sterk variërende snelheidsvelden te maken heeft en of het gaat om stationaire velden, langzaam wisselende of snel wisselende velden. Tot dusverre bleek alleen bij stationaire velden in combinatie met stationaire of bijna stationaire concentratieverdelingen duidelijk dat onaanvaardbare effecten kunnen ontstaan wanneer men louter rekenkundig interpoleert, zonder te letten op fysische nevenvoorwaarden. Hoewel hiermee niet is aangetoond dat deze kwestie bij veranderlijke velden van geen belang is, is het toch wel plausibel dat stationaire situaties het meest kritisch zijn. We gaan daarom in het onderstaande wat nader in op stationaire velden en deeltjes die zich daarin bewegen.

Stel we hebben een tweedimensionaal stationair snelheidsveld dat reeds in continue vorm gegeven is en dat ook de continuïteit van de vloeistof garandeert. Een (tweedimensionale) deeltjesbaan in een dergelijk veld komt overeen met een stroomlijn en moet noodzakelijkerwijs gesloten zijn binnen het beschouwde gebied of daar buiten, d.w.z. in het laatste geval het gebied op één punt binnenkomen en op een ander punt verlaten. Om de gedachten te bepalen is een dergelijk veld in de vorm van een aantal deeltjesbanen ofwel stroomlijnen in figuur 3 weergegeven voor een model van het IJsselmeer bij een bepaald, door een stationaire wind geïnduceerd, stroombeeld. Afgezien van de modelschematisatie komt een dergelijke streng stationaire situatie in oppervlaktewateren natuurlijk nooit voor. Toch is het bijzonder nuttig hem in het model te onderzoeken, omdat ook wanneer het stationaire veld wordt aangevuld met veranderlijke elementen noodzakelijk voor een meer realistisch deeltjesgedrag, de bijdrage van het "onderliggende" stationaire veld aanwezig blijft. Zijn invloed wordt wel enigszins getemperd, maar vaak nauwelijks verminderd.

Voldoet het stationaire veld niet in voldoende mate aan de genoemde voorwaarden, dan betekent dit dat op bepaalde plaatsen deeltjesbanen doodlopen; hetzij abrupt, hetzij dat spiralen worden gevormd. Er is geen wezenlijk verschil tussen naar binnen of naar buiten "spiraliseren", omdat een stationair snelheidsveld dat aan een continuïteitsvoorwaarde voldoet zonder meer kan worden omgekeerd van teken; aan de stroomlijnen verandert niets. De genoemde

verstoringen houden een ongelimiteerde afvoer of aanvoer van deeltjes in. Neemt men hiervoor waterdeeltjes, dan is opnieuw duidelijk dat niet aan een continuïteitswet voldaan wordt. Is er een vrije waterspiegel dan zal op de genoemde plaatsen een onbegrensde stijging of daling van deze waterspiegel optreden. In bepaalde gevallen kan deze stijging of daling wel eens zo langzaam verlopen dat het effect bij een deeltjes-transport-berekening binnen aanvaardbare grenzen blijft; het wordt dan door het aanvullende subgrid-mechanisme in voldoende mate gekompenseerd. In de praktijk is gebleken dat dit al vrij spoedig niet meer het geval is. De concentratie stijgt alleen in de meeste gevallen niet meer onbepaald zodra men het suppletie-mechanisme inschakelt, maar blijft dan op een bepaalde eindige (doch veel te hoge of te lage) waarde hangen. Er is dan evenwicht ontstaan tussen advectieve aanvoer of afvoer door het gebruikte snelheidsveld en de "diffusie" door het toegevoegde mechanisme.

De praktijk heeft aldus uitgewezen dat men stationaire velden niet op willekeurige wijze mag interpoleren maar daarbij de vloeistofcontinuïteit, in ieder geval in bepaalde mate, in de beschouwing moet betrekken. Gewone continuïteit van de snelheid als functie is daartoe wel noodzakelijk maar uiteraard niet voldoende. De meest simpele methode van interpolatie, eerst de componenten u en v in één punt samenbrengen door lineaire interpolatie en daarna (bij voorbeeld) bilineair interpoleren, tast de vloeistofcontinuïteit het meest ernstig aan. Zelfs de aanvankelijk wel aanwezige balans per vak, begrensd door "debietranden" (figuur 4) wordt hierbij verstoord. Een minimale eis is wel, dat men de debieten door de wanden van het vak onaangetaast laat. Men kan dit doen door het gemiddelde van de loodrechte snelheidscomponenten gelijk te houden aan de gegeven waarde onder het motto dat men de (totale) waterdiepte H onveranderd laat, maar dit garandeert niet het juiste debiet als men H niet konstant houdt langs elke vakgrens. Dit laatste kan niet meer zodra men van H eist dat hij continu is in x en y . De volgende stap is dus wel, te eisen dat

$$\int_{\Delta x} vH \, dx \text{ en } \int_{\Delta y} uH \, dy$$

langs alle vakgrenzen exakt gelijk zijn aan de gegeven debieten

door de vakranden. Dit kan op verschillende manieren gebeuren, zodanig dat uH en vH continue functies zijn langs de volledige doorsneden (tussen de modelgrenzen) die langs de vakranden lopen. Binnen de vakken interpoleert men (al of niet lineair) uH en vH tussen de respektievelijke, tegenover elkaar gelegen vakranden en vervolgens deelt men door een niet-negatieve continue functie $H(x,y)$, uiteraard zo goed mogelijk aansluitend op de gegeven h - en ζ -waarden, desgewenst ook zodanig dat de gemiddelden van de verkregen snelheidskomponenten langs de vakranden gelijk zijn aan de overeenkomstige waarden in het w.b.m.

Het enige dat men op deze wijze zeker weet, is dat "op de vakken" ($\Delta x, \Delta y$) in differentievorm voldaan is aan een continuïteitswet, maar in de overige punten zullen afwijkingen optreden, waarbij bovendien de waarde van

$$\operatorname{div} \vec{Q} = \frac{\partial (uH)}{\partial x} + \frac{\partial (vH)}{\partial y} \quad (3)$$

bij het passeren van de vakgrenzen sprongen zal vertonen (behalve eventueel op lijnen samenvallend met vakgrenzen) als gevolg van de interpolatie binnen de vakken (figuur 5). In figuur 6 is de waarde van (3) langs een bepaalde doorsnede (//x- of y-as) weergegeven. De waarde schommelt weliswaar rond de nul maar is op een aantal geïsoleerde punten na ongelijk aan nul, zodat spiraalvormige of abrupt doodlopende stroomlijnen niet uitgesloten zijn, wat ook uit berekende deeltjesbanen blijkt (figuur 7).

Het is duidelijk dat het ideale snelheidsveld niet alleen "op vakken", maar in elk punt aan een continuïteitsvoorwaarde moet voldoen. Deze eis lijkt alleen realiseerbaar voor gepostuleerde velden, maar niet voor velden die op alle vakranden Δx en Δy van een gegeven rooster een voorgeschreven (geïntegreerde) waarde moeten hebben. In plaats van het ideale veld zullen we moeten zoeken naar een veld waarin de "residuën" in de waterbalans zoals weergegeven in figuur 6, zijn teruggebracht naar een aanvaardbare waarde (op wat aanvaardbaar is wordt nog teruggesproken). Een oplossing voor dit probleem is gevonden^{11,12} in de vorm van een procedure waarbij de gegeven roostervakken een aantal malen onderverdeeld worden in kleinere (figuur 8), zodanig dat voor de kleinere vakken telkens weer opnieuw aan de balans wordt voldaan en de debietfuncties langs

iedere doorsnede tussen de modelranden ook steeds kontinu blijven. Daarbij is wegens het steeds kleiner worden van de vakjes afgezien van het gebruik van tweede (of hogere) graads-funkties. Het blijkt ook mogelijk zodanig te interpoleren dat geen details in de snelheidsfunkties geïntroduceerd worden die niet voortvloeien uit de oorspronkelijke gegevens (figuur 9). Zoals de figuur illustreert, worden hierdoor de hoeken tussen de lijnstukken die de denkbeeldige limietkrommen voor de debieten steeds dichter benaderen bij iedere deling globaal een faktor 2 kleiner, zodat hetzelfde verwacht mag worden van de "residuën" van (3). Stilzwijgend wordt nog steeds gedacht aan het stationaire geval, dus het geval dat (3) in de limiet overal nul moet worden. Ook alleen voor dit geval is het procédé volledig uitgewerkt en toegepast (voor enkele resultaten zie de figuren 10, 11 en 12). Het is de vraag in hoeverre er in de praktijk behoefte zal zijn aan een overeenkomstig procédé voor niet-stationaire velden. Zeker voor velden die zo snel en sterk wisselen als getijsnelheden in Nederlandse estuaria, Waddenzee etc., bestaat er waarschijnlijk geen behoefte aan overeenkomstige voorzieningen. Deze verwachting is gebaseerd op een vergelijking van de fouten in de waarden van (3) (zoals voor een stationair geval weergegeven in figuur 6) en de werkelijke waarden ($\frac{\partial H}{\partial t}$) als funkties van tijd en plaats in een getijsituatie.

3. Aanvulling door additionele snelheidsvelden of andere mechanismen

3.1. Random-verplaatsingen

De auteur die in 1973 de deeltjes-simulatie van transportverschijnselen in 2DH-modellen voor oppervlaktewateren geïntroduceerd heeft (Maier-Reimer¹⁶), gaf als suppletiemechanisme een random walk-benadering aan. In zijn ogen was dit een zo essentiële bestanddeel van zijn transportmodel dat hij dit in zijn geheel als "Monte Carlo-model" aanduidde. De overige waterbeweging was in zijn onderzoek ook in zoverre ondergeschikt dat tijdafhankelijkheid wel tot interessante subgrid-structuren leidde zoals reeds getoond in figuur 1, maar plaatsafhankelijkheid nauwelijks aanwezig was. Het gebruikte waterbewegingsmodel was zeer grofmazig en M.R. beperkte

zich tot lengteschalen nauwelijks groter dan één maaswijdte. De tijdafhankelijkheid van het gegeven snelheidsveld is van belang bij continue lozingen (figuur 1), maar momentlozingen worden beheerst door (eventuele) plaatsafhankelijkheid van het gegeven veld en voor het overige door het toegevoegde mechanisme. De schaal waarop M.R. werkte (v.w.b. zijn dissertatie) was nu zodanig dat het gedrag van zijn momentlozingen vrijwel geheel bepaald werd door het toegevoegde mechanisme, zijn "Monte Carlo-Verfahren". Dit had in zekere zin een voordeel, omdat op deze manier duidelijk bleek dat voor kleinere schalen een gewone random walk-konceptie met een "dronkemans-stap" van (gemiddeld) konstante lengte ontoereikend was. Met dit klassieke concept, dat bij voorbeeld moleculaire diffusie en Brownse beweging korrekt beschrijft, breidt een wolk van deeltjes in twee dimensies zich met afnemende snelheid uit; de "diameter"*) groeit aan volgens de wortel uit de tijd. In oppervlaktewateren is de uitbreiding o.m. als gevolg van de spektrale opbouw van het snelheidsveld meestal zodanig dat hogere machten van t optreden. Voor de Noordzee en vele andere wateren voldoet een exponent = 1 voor grote trajekten zeer redelijk. In elk geval blijft een ontwikkeling volgens $t^{\frac{1}{2}}$ op den duur altijd achter. M.R. wist dit voor de Noordzee vooral uit de experimenten van Joseph en Sendner. Om hiermee overeenstemming te verkrijgen moest hij een meer progressief "Monte Carlo-Verfahren" invoeren. Hij deed dit door bij een puntvormige momentlozing op $t=0$ de random-staplengte volgens t^{α} (α konstant) te laten aangroeien. Men kan gemakkelijk bewijzen dat hiermee bij afwezigheid van andere mechanismen (dus o.m. bij verwaarloosbare invloed van gradiënten in het gegeven snelheidsveld) een aangroei van de wolkdiameter (in twee dimensies) met $t^{0,5+\alpha}$ resulteert. M.R. komt op grond van vergelijking met experimenten tot waarden $\alpha=0,5, 0,65$ en $1,0$, waarmee dus een aangroei van de wolkdiameter met resp. $t^1, t^{1,15}$ en $t^{1,5}$ zou korresponderen. Aangetekend moet nog worden dat M.R. bij de meeste berekeningen nog een extra random-verplaatsing in de richting van de momentane lokale gegeven snelheid toevoegt voor het afzonderlijk in rekening brengen van de scherings-dispersie die het gevolg is van verticale snel-

*) bij isotropie evenredig met de wortel uit de variantie. Meer algemeen te definiëren met de "equivalent radii" van Joseph en Sendner¹⁵. Zie ook Okubo¹⁸ (σ_{rc}).

heidsverschillen in combinatie met verticale uitwisseling.

Men ziet in de rekenresultaten van M.R. na verloop van tijd een kleine toename optreden van de exponent van t waarmee zijn deeltjeswolken groeien. Hij trekt daar niet de konklusie uit dat hier geleidelijk de gradiënten van het gegeven veld een rol gaan spelen en dat dit in toenemende mate het geval zal zijn bij langere voortzetting van de berekening zodat een afremming van de stapgroei volgens t nodig zal zijn om een steeds grotere diskrepantie tussen experiment en simulatie te voorkomen. Door de beperkte schaal van de berekeningen van M.R. bleef de afwijking beperkt. Passeert men ruimschoots de maaswijdte van het snelheidsrooster, dan wordt het effect belangrijk en tenslotte zal men de aangroei van de random-stap volledig moeten stopzetten.

Door de Fysische Afdeling is het idee van M.R. in een aantal programma's overgenomen, aangevuld met de modifikatie dat de groei van de random-verplaatsing inderdaad wordt afgeremd en de verplaatsingen op den duur konstant worden (bij konstante tijdstaplengte). De afremming geschiedt met de formule

$$ds = dt \times v_c \times \left(t_L^{-\alpha_{op}} + \tau_\lambda^{-\alpha_{op}} \right)^{-\frac{1}{p}} \quad (4)$$

In figuur 13 wordt de betekenis van de parameters aangegeven. Voor wat meer bijzonderheden zie lit. 8. De getalwaarden voor de parameters worden bepaald door vergelijking met experimenten.

Aantrekkelijk in deze methode zijn eenvoud en ekonomie van reken-inspanning. De bezwaren zijn van fysische aard. De methode impliceert dat elk deeltje "weet" wanneer het uit bron of lozingspunt vertrokken is, wat fysisch onzin is. Een "oud" deeltje beweegt zich in het model grilliger dan een "jong". Een groep "oude" deeltjes kan na een rondgang in een cirkulerende waterbeweging zich met een groep "jonge" deeltjes vermengen. Beide groepen gedragen zich op precies dezelfde plaats zeer verschillend. Toch is het moeilijk aan te geven wanneer en in hoeverre onrealistische resultaten zullen ontstaan.

3.2. Kunstmatige velden

De fysische bezwaren zijn overigens voldoende aanleiding om

alternatieven te zoeken. Een overweging is ook dat een meer op het werkelijke mechanisme aansluitende methode in het algemeen minder parameters zonder direkt-fysische betekenis zou bevatten en mogelijk zelfs uitsluitend meetbare grootheden zoals snelheden, frequenties, golfgetallen. Daarom werd in een vroeg stadium al een alternatieve benadering voorgesteld^{3,5,6}, namelijk de meest voor de hand liggende maar mogelijk op praktische bezwaren stuitende oplossing, het ontbrekende "subgrid"-snelheidsveld in een benaderde vorm aan het gegeven veld toe te voegen. Het meest eenvoudig leek een veld van de vorm

$$(v_x, v_y) = \left[a_j \cos\left(\frac{2\pi y}{\epsilon_j \lambda_j} + \phi_{x_j}\right), \epsilon_j a_j \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda_j} + \phi_{y_j}\right) \right] \quad (5)$$

($\epsilon_j = 1$ bij isotropie)

opgebouwd uit "wervels" met diameters λ_j , als benadering van het ontbrekende deel van het "spektrum". Tijdafhankelijkheid zou op eenvoudige wijze kunnen worden toegevoegd. Als bezwaar werd gesignaleerd dat kleine wervels niet worden meegevoerd door grotere en dat meevoering van het additionele veld door het gegeven veld ernstige problemen oplevert zodra het gegeven veld uitgesproken inhomogeen is. Naar oplossingen wordt nog gezocht. Met velden van de aangegeven vorm zijn los van de velden uit waterbewegingsmodellen tal van numerieke experimenten verricht die het inzicht in de kinematika van verspreidingsverschijnselen hebben verdiept¹⁰.

3.3. Invloed van waterdiepteverschillen

Het gegeven snelheidsveld, berekend door het waterbewegingsmodel, draagt de invloed van de bij de berekening gehanteerde waterdiepten volledig met zich mee. Korrekties zijn dus overbodig. Wel lijkt het van belang dat wanneer in andere operaties, zoals omrekening tussen 2D- en 3D-koncentraties en het invoeren van additionele transportmechanismen waterdiepten worden gebruikt, deze zo goed mogelijk te doen overeenstemmen met de waterdiepten die het berekende snelheidsveld in sterke mate hebben bepaald. Om te beginnen dient zich al een interpolatieprobleem aan, analoog aan dat bij de snelheden. De totale waterdiepte $H(x,y) = h(x,y) + \zeta(x,y)$ is

slechts in diskrete punten gegeven en h en ζ bovendien niet op hetzelfde rooster. Dit probleem trad echter ook al op als onderdeel van de afleiding van de snelheidsvelden die in verband met de continuïteitsvoorwaarde in eerste instantie in de vorm (uH, vH) behandeld werden. We kunnen er dus van uitgaan dat een kontinu H -veld uit hoofde van de afleiding van snelheden (paragraaf 2) vastligt.

Welke rol speelt het diepteveld nu bij de aanvullende mechanismen?

3.3.1. Bij kunstmatige snelheidsvelden

Wanneer gesuppleerd wordt met kunstmatige velden in analytische vorm, zoals (5) of een tijdafhankelijke variant daarvan, dan zal zo'n kunstmatig veld in eerste instantie voldoen aan een zuiver tweedimensionale continuïteitswet, dus als het veld wordt voorgesteld door $\vec{v}_0 = (U_0, V_0)$, dan geldt

$$\frac{\partial U_0}{\partial x} + \frac{\partial V_0}{\partial y} = 0 \quad (6)$$

We zoeken echter een veld (U, V) , waarvoor op elk moment geldt

$$\frac{\partial(UH)}{\partial x} + \frac{\partial(VH)}{\partial y} = 0 \quad (7)$$

als $H = H(x, y, t)$ het momentane diepteveld is van het model waarin we (U, V) aan de gegeven (u, v) willen toevoegen. We gaan er hierbij vanuit dat we geen extra waterstandsverschillen willen introduceren. Definiëren we nu voor elk punt (x, y)

$$U = \gamma H^{-1} U_0 \quad V = \gamma H^{-1} V_0 \quad (8)$$

(γ een willekeurige faktor die niet van x en y afhangt)

dan voldoet dit veld (U, V) wegens (6) aan (7) mits $H \neq 0$. Op plaatsen waar $H \leq 0$ is wordt niet om deeltjessnelheden gevraagd, omdat daar geen water staat. Waar het veld funktioneert, dus waar $H > 0$, komen (U, V) en (U_0, V_0) in richting overeen en leveren ze exakt dezelfde deeltjesbanen op. Willen we gemakshalve (U, V) en (U_0, V_0) dezelfde grootteorde geven, dan kan dit worden bereikt met $\gamma = \bar{H}$ (middeling over het gehele gebied waar $H > 0$).

3.3.2. Bij random-technieken

Een techniek met horizontale random-verplaatsingen die niet van de plaats (x,y) afhangen (en dus ook niet van $H(x,y)$) is naar zijn aard zuiver tweedimensionaal en dientengevolge gelijkwaardig met een zuiver tweedimensionaal diffusieproces. Daarbij is de diffusiecoëfficiënt K (bij anisotropie de tensor \vec{K}) konstant als de (gemiddelde) random-staplenkte bij konstante tijdstap konstant is, terwijl als de staplenkte geleidelijk verandert (par. 3.1) dit een overeenkomstige verandering van K impliceert^{4, 6, 8, 16}. We kunnen ons gevoeglijk beperken tot een konstante $ds = |\vec{ds}|$ bij vaste tijdstappen dt , zoals voor voldoende grote tijden (c.q. lengteschalen) ook optreedt als (4) wordt toegepast. De bekende eigenschappen van een klassiek diffusieproces gelden in het 2D-geval voor de 2D-koncentratie C_2 (hoeveelheid per oppervlakte-eenheid). De "gewone" driedimensionale concentratie C_3 als functie van x en y wijkt af van die van C_2 zodra $H = H(x,y)$:

$$C_3(x,y) = \frac{C_2(x,y)}{H(x,y)} \quad (9)$$

Alleen als de waterdiepte uniform is zijn de verdelingen op een konstante faktor na gelijk.

We kunnen dit feit niet in rekening brengen door een berekende $C_2(x,y)$ achteraf door $H(x,y)$ te delen, zoals met een eenvoudig voorbeeld is te illustreren. Beschouw een afgesloten gebied zonder bronnen of putten, maar wel met een voldoende groot aantal deeltjes. Deze zullen zich na verloop van tijd onder invloed van een 2D-random-proces als in het voorgaande aangegeven, op statistische schommelingen na (kleiner naarmate het aantal deeltjes groter is) uniform verdeeld hebben in tweedimensionale zin: $C_2(x,y)$ uniform. Volgens (9) is dan $C_3(x,y)$ omgekeerd evenredig met de waterdiepte. In de werkelijkheid is het stochastische proces driedimensionaal en wordt C_3 uniform en $C_2 = HC_3$ evenredig met de diepte.

We zullen het 2D-random-proces zodanig moeten modificeren dat het bekende 3D-resultaat wél wordt verkregen. We bezien het probleem eerst ééndimensionaal. We veronderstellen een lineair verloop van de waterdiepte,

$$H = H_0 + ax \quad (10)$$

waarbij men zich gemakshalve een horizontale waterspiegel en een bodemhelling a kan voorstellen (figuur 14), maar deze voorstelling speelt bij de verdere gang van zaken geen rol. Wel nemen we aan dat er geen systematische snelheden zijn en dat dienovereenkomstig H onafhankelijk van t is. Het diffusieve transport kan geschreven worden

$$T_d = -HK \frac{\partial C_3}{\partial x} \quad (11)$$

Beschouw het geval zonder bronnen en putten nadat de homogenisering reeds heeft plaats gehad:

$$\frac{\partial C_3}{\partial x} = 0 \rightarrow T_d = 0 \quad (12)$$

Ons random-proces moet deze situatie behouden. Zolang het proces zuiver random-2D is, leidt het echter tot

$$\begin{aligned} T_d &= -K \frac{\partial C_2}{\partial x} = -K \frac{\partial (HC_3)}{\partial x} = -KC_3 \frac{\partial H}{\partial x} - KH \frac{\partial C_3}{\partial x} = \\ &= -KC_3 \frac{\partial H}{\partial x} = -aKC_3 \quad (\text{zolang } \frac{\partial C_3}{\partial x} \text{ nog} = 0) \end{aligned} \quad (13)$$

Dit transport is onafhankelijk van x en leidt dus in eerste instantie niet tot concentratieveranderingen, maar doordat we in de werkelijkheid met een eindig gebied te maken hebben (zelfs in theorie kan een gebied met $H = H_0 + ax$ zich wegens $H > 0$ niet naar twee zijden onbeperkt uitstrekken) zullen deze veranderingen wel optreden, totdat C_2 uniform geworden is (dus $C_3 \sim H^{-1}$) en $T_d = 0$. We moeten dus zorgen dat direkt $T_d = 0$, als bij (12), m.a.w. aan het random-proces dat tot het transport (13) leidt, moet een tegengesteld (hellingafwaarts) transport aKC_3 worden toegevoegd. Een transport evenredig met C_3 is een transport met advectief karakter en met snelheid

$$u_c = \frac{aK}{H} \quad (14)$$

Dit kan in termen van deeltjesverplaatsingen worden verkregen door elk deeltje per tijdstap dt een verplaatsing $ds' = u_c dt$ in hellingafwaartse richting te geven. Nu geldt ook nog in het ééndimensionale geval:

$$K = \frac{ds^2}{2dt} \quad (1D) \quad (15)$$

zodat

$$ds' = \frac{ads^2}{2H} = \frac{1}{2H} \frac{dH}{dx} ds^2 \quad (16)$$

Er mag worden aangenomen dat (voor het 1D-geval) dit resultaat bij voldoende kleine ds en dt algemene geldigheid heeft. Men kan dan immers altijd het beschouwde gebiedje wel zo klein kiezen dat de helling als konstant beschouwd mag worden. Overigens is een bewijs voor hogere-orde-benaderingen van $H(x)$ wellicht ook leverbaar. Verder is het resultaat afgeleid uit de eis dat een homogene verdeling homogeen blijft. Is de verdeling inhomogeen dan wordt het evenwicht verbroken en heeft het transport een zodanige richting dat de toestand zich in de richting van homogeniteit beweegt. Een strengere redenering wordt graag aan de lezer overgelaten.

De volgende stap is, te trachten ook voor het tweedimensionale geval een korrektieformule af te leiden. We beperken ons daarbij in zoverre, dat we een gebied bekijken waar de bodem wel helt (in een richting x_i , wederom $\frac{\partial H}{\partial x_i} = a (= \text{tg} \alpha, \text{figuur } 15A)$) maar door een plat vak V kan worden voorgesteld. Het is weer niet essentieel of $\frac{\partial H}{\partial x_i}$ inderdaad overeenkomt met de bodemhelling of deels ook veroorzaakt wordt door een helling van de waterspiegel. In ons 2 DH-model werken we a.h.w. met een bovenaanzicht (figuur 15B). Ieder deeltje, bij voorbeeld in een punt P op een willekeurige lijn $AA \perp x_i$ ondergaat bij elke tijdstap een verplaatsing ds in willekeurige richting ϕ , met vaste lengte $ds = |\vec{ds}|$. In het concept van M.R. is ds alleen gemiddeld konstant, maar dit heeft bij voldoende aantallen stappen en deeltjes geen enkele invloed op het resultaat. We kunnen zelfs nog verder gaan en alleen componenten $\pm dx_i = \pm \frac{1}{2} ds \sqrt{2}$ in x_i -richting en $\pm dy_i = \pm dx_i$ loodrecht daarop toestaan (random keuze tussen + en - voor beide richtingen), resulterend in uitsluitend verplaatsingen ter lengte ds in de richtingen I, II, III en IV. Ook hier is het resultaat bij voldoende aantallen stappen en deeltjes weer geheel hetzelfde als bij random ϕ en vaste ofwel gemiddelde lengte ds (vergelijk bij voorbeeld de resultaten met vaste x - en y -componenten in Csanady¹, blz. 30...34 met de algemenere afleidingen van Einstein¹³ en Pasmantier¹⁹).

We hebben de random-beweging nu ontbonden in de richting van

de helling, x_i , en de richting loodrecht daarop, waarin de helling nul is. Alleen de eerste komponent veroorzaakt een transport dat in de werkelijkheid nul is als de concentratie (in een zekere omgeving van P) uniform is. Dit transport moet weer gekompenseerd worden, maar door de ontbinding verkeren we nu weer in het ééndimensionale geval waarvoor (12) is afgeleid, waarbij nu dx_i de plaats van ds in (12) inneemt. Uitgedrukt in de tweedimensionale ds m.b.v. $dx_i = ds\sqrt{2}$ vinden we

$$ds' = \frac{1}{4H} \frac{\partial H}{\partial x_i} ds^2 \quad (17)$$

Dit zelfde resultaat kan eigenlijk veel sneller afgeleid worden door de ontbinding van de random-beweging niet feitelijk uit te voeren, maar te konstateren dat de ééndimensionale beschouwing volgens (10) t/m (16) gezien de aangenomen uniformiteit van de hellingsektor (bodemgradiënt) en van de concentratie C_3 eigenlijk zonder meer toepasbaar is, maar dat in het isotrope 2D-geval de diffusiecoëfficiënt voor een willekeurige richting niet gegeven wordt door (15) maar door

$$K = \frac{ds^2}{4dt} \quad (2D) \quad (18)$$

hetgeen dan van (14) onmiddellijk tot (17) voert. Zo is nog wel een aantal andere redeneringen mogelijk die tot hetzelfde resultaat (17) leiden. Dit resultaat houdt in dat men elk deeltje bij elke tijdstap een hellingafwaartse verplaatsing in de richting van de bodemgradiënt moet geven volgens (17), waarin x_i de gradiënt-richting voorstelt. In hoeverre deze korrektie ook bij een plaatsafhankelijke bodemgradiënt nog voldoet, kan misschien het beste experimenteel onderzocht worden. Daarbij dient het deterministische advektieve transport echter eerst goed te zijn afgeregeld volgens de lijnen aangegeven in het laatste gedeelte van paragraaf 2, daar anders de inhomogeniteiten in een evenwichtsverdeling van de concentratie, veroorzaakt door de defekten in de waterbalans, al spoedig groter zijn dan die, veroorzaakt door de invloed van de waterdiepteverschillen op het "diffusieve" transport. Een getalmatige vergelijking van de snelheden die in het spel zijn, toont dit aan. Daarbij moet men zich realiseren dat inhomogeniteiten (in een even-

wichtssituatie) die door defekten in de waterbalans worden veroorzaakt, afhangen van de diffusiviteit. Is deze nul, dan gaat de opeenhoping van deeltjes in punten met een positief overschot (een parasitaire $\frac{\partial H}{\partial t} > 0$), onbeperkt door, m.a.w. het model bereikt in het geheel geen evenwicht. Dat dit wél gebeurt is te danken aan het toegevoegde mechanisme, zoals de zojuist besproken random walk.

Het is nog wel interessant zich af te vragen wat er gebeurt, wanneer het ééndimensionaal afgeleide resultaat (16) rechtstreeks wordt overgedragen naar de tweedimensionale situatie, door aan te nemen dat het wel korrekt zal zijn als men voor elk deeltje per tijdstap voor de richting x de (hellingafwaartse) richting langs \vec{ds} neemt. Men beschouwe daartoe figuur 16 naar analogie van figuur 15A en 15B. In een aantal rechthoekige driehoeken zijn de diverse lijnstukken te berekenen waarmee men kan vinden hoe de helling in de richting van \vec{ds} afhangt van ϕ en α . Men vindt zo voor elke richting ϕ een additionele verplaatsing met een komponent in de hellingafwaartse richting langs de bodemgradiëntvektor en een komponent loodrecht daarop. De eerste komponent heeft voor alle deeltjes (alle ϕ -waarden) dezelfde (hellingafwaartse) richting. Zijn gemiddelde is precies gelijk aan (17). Toch is hiermee niet precies hetzelfde bereikt als loutere toepassing van (17), want weliswaar hebben de verplaatsingen $\perp x_i$ door de andere komponent gelijke kansen om in de "+ y_i "- als om in de "- y_i "-richting te vallen, maar een dergelijk mechanisme zonder voorkeur voor + of - geeft wel een extra diffusie in de richting y_i ! M.a.w. men verkrijgt wel de beoogde correctie ter voorkoming van inhomogeniteiten in situaties die homogeen behoren te zijn, maar men heeft wat extra diffusie langs de dieptelijnen! Het zal doorgaans een klein effect zijn, dus wie de geschetste aanpak kiest komt niet zonder meer van de regen in de drup.

4. Nauwkeurigheid en rekentijden

4.1. Uit de voorgaande paragrafen is wel gebleken dat de nauwkeurigheid van het model sterk bepaald wordt door wat aan de eigenlijke transportberekeningen voorafgaat. Men moet in de eerste plaats zorgen dat snelheidsvelden op zodanige wijze uit de gegeven

matrices worden afgeleid, dat de afwijkingen in de lokale waterbalans niet voeren tot onaanvaardbare parasitaire transporten van of naar de plaatsen waar (3) respectievelijk negatieve of positieve afwijkingen vertoont van de juiste waarde (par. 2). De ervaring tot op heden leert dat dit vooral van belang is als "de juiste waarde" voor onbepaalde tijd konstant is, wat in de praktijk betekent: gelijk aan nul en tevens vrijwel altijd: stationaire stroming. In getijgebieden, in het bijzonder estuaria, is de kwestie in elk geval veel minder kritisch, mogelijk zelfs van geen belang. Criteria moeten nog nader worden uitgewerkt.

4.2. In de tweede plaats moet in de te gebruiken programmatuur een correctie zijn ingebouwd die bij een in aanleg tweedimensionaal suppletie-mechanisme ten behoeve van de simulatie van subgridverschijnselen, de afwijkingen compenseert tengevolge van 2D-simulatie in een 3D-geometrie (par. 3.3). Als richtlijn om te bepalen of deze correctie gewenst is, lijkt geschikt, de eenvoudige stelling, dat een 2D-simulatie van uitwisselingstransporten in gevallen dat een uniforme concentratieverdeling zou moeten ontstaan, in feite voert tot een verdeling die omgekeerd evenredig is met de diepte, althans bij (quasi)stationaire toestanden.

4.3. Is aan deze twee zaken voldoende aandacht geschonken, dan is ook al een basis gelegd voor een goede behandeling van randen en randvoorwaarden (zie overigens paragraaf 5).

4.4. Als het voorgaande geregeld is overeenkomstig de te stellen eisen en de kwaliteit van beschikbare gegevens, dan rest (uit het oogpunt nauwkeurigheid) nog slechts het kiezen van een voldoende kleine tijdstap (bij gegeven rekenschema) en een voldoende aantal deeltjes.

4.5. Tijdstap en rekenschema

4.5.1. Tijdstap en snelheidsveld

Een eis voor de tijdstap is, dat met de daaruit volgende verplaatsingen de stroomlijnen in de (x,y) -ruimte bij stationaire stroming en in de (x,y,t) -ruimte bij niet-stationaire stroming in

voldoende mate worden gevolgd. Kortheidsshalve zij hierbij verwezen naar lit. 9, 14 en 21; vermoedelijk zijn er nog wel betere referenties. Wanneer het aanvullende mechanisme (paragraaf 3) een snelheidsveld is (paragraaf 3.2.), zijn er geen andere aspecten dan het zojuist genoemde. Men zal in het algemeen voor het volgen van het gegeven veld een wat strengere eis aanleggen dan voor het aanvullende veld, of, nog wat algemener, voor het korrekt volgen van de grootschalige beweging een strengere eis dan voor meer kleinschalige bewegingen, echter slechts in relatieve zin, d.w.z. men zal bij een kleine gesloten baan een sluitfout tolereren die in vergelijking tot de baandiameter groter is dan bij een grote gesloten baan. In absolute zin zal de toegelaten sluitfout voor de kleinere baan meestal toch kleiner zijn dan voor de grotere, zodat in de praktijk de kleinste details ("golflengten") als regel de keuze van dt bepalen.

Wat het aanvullende veld betreft kan men niet de redenering volgen dat het er niet om gaat dat de wervels werkelijk worden gevolgd, maar slechts om een bepaalde mate van subgrid-inhomogeniteit. Dit leidt er al spoedig toe dat het kunstmatige wervelveld als een mechanisme voor random-verplaatsing gaat werken: een lokale snelheid c.q. wervel oefent op een bepaald deeltje slechts gedurende één tijdstap invloed uit; het deeltje wordt daarbij verplaatst naar een punt met een snelheid die weinig of in een extreem geval in het geheel niet gekorreleerd is met die in het vorige punt. In dat geval kan men even goed met een eenvoudig random proces werken.

Samengevat kiest men, wat de velden betreft, de tijdstap voldoende klein voor een goede weergave van de deeltjesbanen en anderzijds zo groot mogelijk ten behoeve van een zo klein mogelijke rekentijd. Het kiezen van een hogere-orde rekenschema verlaagt het aantal benodigde tijdstappen, maar verhoogt de hoeveelheid rekenwerk per tijdstap. Netto resulteert winst in rekentijd, totdat een bepaalde grens wordt bereikt. Bij random-verplaatsingen (volgende paragraaf) spelen rekenschema's geen rol.

4.5.2. Tijdstap en random-verplaatsing

Is er naast of in plaats van een aanvullend snelheidsveld sprake van een random-verplaatsing, dan komt een staplengte ds (met willekeurige richting in het (x,y) -vlak) overeen met een diffusie-

koëfficiënt K volgens (18), waarbij ds van de deeltjesleeftijd kan afhangen volgens (4) en K dienovereenkomstig. Verandert men dt om één of andere reden, dan zal in eerste instantie K (eventueel: de verschillende K -waarden voor de diverse "leeftijdsgroepen") hetzelfde dienen te blijven teneinde de weergave van het proces globaal ongewijzigd te laten. Dus moet overeenkomstig (18) de waarde van ds worden aangepast volgens

$$ds \sim \sqrt{dt} \quad (19)$$

Is ds geprogrammeerd als $ds = v_s dt$ met v_s als invoervariabele, dan moet men v_s aanpassen volgens

$$v_s \sim \sqrt{\frac{1}{dt}} \quad (20)$$

Men kan uiteraard ook de aanpassing door het programma laten uitvoeren door een voorschrift overeenkomend met (18)...(20).

Er zijn moeilijk redenen aan te geven om een dt die voor het snelheidsveld (inklusief eventuele aanvullende velden) voldoet, ten behoeve van het random-proces kleiner te kiezen. Bij gegeven diffusiviteit wordt bij verkleining van dt de "random snelheid" groter volgens $dt^{-1/2}$ (20), de staplengte $ds = v_s dt$ kleiner volgens $dt^{1/2}$. Het aantal stappen voor het bereiken van een bepaalde verdeling neemt toe volgens dt^{-1} . Meer stappen is statistisch gunstig, maar het aantal stappen zal niet gauw te klein zijn voor een akseptabel resultaat. In vijf stappen (vanuit een momentane puntbron) wordt al een verdeling bereikt waarvan de maximale concentratie de theoretische waarde met een marge van ca. 10% benadert. Het aantal deeltjes moet daarbij natuurlijk groot genoeg zijn om die concentratie met een bijpassende nauwkeurigheid te kunnen "meten". Is het aantal deeltjes te klein, dan helpt een kleinere tijdstap niets.

4.5.3. Tijdstap en maaswijdte van gegeven rooster

Het rooster van het toeleverende w.b.m. legt, althans bij de bestaande programmatuur, een absoluut maximum op aan de te kiezen tijdstap. Het is namelijk niet toegestaan dat een deeltje in één tijdstap meer dan één maaslengte van het natte gebied kan komen. In dat geval werkt de reflektieprocedure voor de oevers niet meer (zie

paragraaf 5.1). Er is weinig reden de procedure aan te passen, zolang dat incidenteel grotere sprongen toelaatbaar zijn. Het aangegeven maximum is immers tevens wel een minimum-eis voor het redelijk volgen van het snelheidsveld, dat afgeleid is uit op het w.b.m.rooster gegeven waarden. In het algemeen zal men de deeltjes niet in slechts 1 à 2, maar in méér stappen een afstand ter grootte van een maaslengte willen laten overbruggen.

4.6. Nauwkeurigheid en deeltjesaantal

Bij het kiezen van het aantal deeltjes is de nauwkeurigheid waarmee men bepaalde concentraties wil benaderen de belangrijkste maatstaf. Als neven-overweging, eigenlijk als vóór-overweging, telt de vraag: is de gevraagde nauwkeurigheid in overeenstemming met de realiteitswaarde van de modelsimulatie.

Feitelijk gaat het om concentraties in relatie tot de optredende gradiënten. Is in een groot gebied de verdeling vrijwel homogeen, dan is het voldoende om in dat gebied als geheel een statistisch voldoende aantal deeltjes te hebben om de concentratie met de gewenste nauwkeurigheid te kunnen schatten. Treedt een concentratieverandering van belang op over een korte afstand L , en wil men deze structuur inderdaad "oplossen", dan zal het zelfde statistisch benodigde aantal deeltjes thans binnen een oppervlakje L^2 aanwezig moeten zijn. Nu komen de vlakkere gebieden in het algemeen overeen met de lagere concentraties, zodat de beide eisen tot ongeveer hetzelfde totale gewenste aantal deeltjes in de berekening kunnen leiden.

Vaak heeft men tevoren reeds een globaal idee van de te verkrijgen concentratieverdeling en kan men aan de hand van vraagstelling of interesse het gewenste deeltjesaantal direkt goed schatten. Is dit niet zo, dan voert men eerst een oriënterende berekening uit.

Veelal gaat de interesse in hoofdzaak of uitsluitend uit naar een bepaald gedeelte van het concentratieveld. Dit bepaalt dan de keuze. Het eenvoudigst ligt dit doorgaans bij momentlozingen, waarbij men dikwijls alleen maar geïnteresseerd is in het verloop van de maximum-concentratie in de tijd. Hiervoor zijn enkele honderden deeltjes voldoende. Soms ligt het bij momentlozingen nog eenvoudiger, namelijk wanneer men de dispersieve eigenschappen van het ge-

bied reeds kent. Het verloop van de maximum-koncentratie als functie van de tijd varieert in een gebied (vaak de gehele modelregio) vaak zo weinig met tijdstip en plaats van lozing, dat men deze functie voor het beoogde doel (bij voorbeeld in een kalamiteitenmodel) als een vast gegeven kan beschouwen. Dan gaat het er alleen maar om het zwaartepunt van de deeltjeswolk te kunnen volgen en kan men met 50 à 100 deeltjes volstaan.

Kontinue lozingen vragen om grotere aantallen deeltjes, ook wanneer men niet (gelijktijdig) alle onderdelen van de concentratieverdeling hoeft op te lossen. Deeltjes-aantal korrespondeert hier met deeltjesdebiet. De grootste gradiënten treden op in een omgeving van de bron. Van nature treft men daar (bij konstant deeltjesdebiet) vanzelf hogere deeltjeskoncentraties aan dan in de afgelegen vlakke gebieden, maar als men het "near field" in alle details die het model nog aankan wil oplossen, dan is hiervoor in het algemeen toch een groter deeltjesdebiet nodig dan voor het "far field". De evenwichtskoncentraties voorzover dit niet de tot het far field behorende achtergrondskoncentraties betreft, komen in het near field in veel kortere tijd tot stand dan in het far field. Daarom kan men bij een simulatie die beide aspecten moet dekken volstaan met een verhoogd deeltjesdebiet gedurende een korte laatste fraktie van de totale lozingstijd. Loost men in die periode bij voorbeeld 80 maal zo veel deeltjes per tijdseenheid als daarvoor, dan moet men bij de verwerking (paragraaf 8) deze deeltjes natuurlijk slechts één tachtigste van het gewicht van de andere deeltjes toekennen. Of men deze dubbele berekening inderdaad als één run uitvoert, hangt af van de opbouw van het programmapakket.

4.7. Rekentijd

Afgezien van kleine, min of meer vaste bestanddelen is de rekentijd rechtevenredig met het aantal deeltjesverplaatsingen. Zijn er konstant M deeltjes in de berekening dan is het aantal deeltjesverplaatsingen $= M \times N$ als N het aantal tijdstappen is.

Als M het totaal aantal aanwezige deeltjes is aan het einde van een berekening met een konstante continue lozing (zonder andere bijdragen, zoals een reeds aanwezige concentratieverdeling bij het begin), dan is het gemiddeld aanwezige aantal deeltjes $= \frac{1}{2}M$ en het aantal deeltjesverplaatsingen bedraagt $\frac{1}{2}M \times N$. Merk op dat voor een

kontinue lozing bij gegeven deeltjesdebiet en tijdstaplenkte het aantal deeltjesverplaatsingen en dus de rekentijd evenredig is met het kwadraat van de simulatieperiode

Met een machine als de UNIVAC1100 kost één deeltjesverplaatsing ongeveer 10^{-3} s CPU-tijd, meestal iets minder, afhankelijk van het type model en de orde van het rekenschema. Dit kan leiden tot zeer uitéénlopende rekentijden. Enkele voorbeelden:

- Westerschelde, kalamiteitenmodel. Snelheden tot ca. 2 ms^{-1} , gemiddeld natuurlijk kleiner. Maaswijdte van het gebruikte WAQUA-model en dientengevolge van de gebruikte oeverschematisatie (die ook het reflektieprocédé bepaalt): 400m. Absolute bovengrens voor dt wordt dus gegeven door $2 \text{ ms}^{-1} \times dt < 400 \rightarrow dt < 200 \text{ s}$. Daar de snelheden gemiddeld een stuk kleiner zijn is 200 s wel aanvaardbaar wanneer als supplement van het gegeven snelheidsveld alleen random-verplaatsingen worden toegepast. Deze konklusie zou niet gelden als het snelheidsveld stationair was en daarom hoge eisen m.b.t. korrrekte deeltjesbanen zouden gelden. Een kalamiteitenberekening voor 100 deeltjes over een periode van 2 etmalen vereist dus $100 \times 2 \times 86400 : 200 = 86400$ deeltjesverplaatsingen, dus globaal 86 s UNIVAC-CPU-tijd.

- IJsselmeer, continue lozing in een inwendig punt, stationair wind-geïnduceerd snelheidsveld met maximale waarden van $0,1 \text{ ms}^{-1}$; maaswijdte van het gebruikte WAQUA-model 2000m, aantal aktieve vakken 300. Bij gebruik van een tweede-orde-rekenschema worden met $dt = 12000 \text{ s}$ sluitende deeltjesbanen verkregen met het gegeven snelheidsveld (zonder suppletie). Bij toepassing van random walk kan met deze tijdstap worden volstaan. Suppletie-wervels, die per definitie kleiner zijn dan de aanwezige "wervels" in het gegeven veld zouden een kleinere tijdstaplenkte vereisen. Evenwicht in het far field blijkt zich pas na ca. 3 jaar te hebben ingesteld; in die tijd is ca. 75% van de geloosde materie door de spuisluizen verdwenen. Om een beeld van de far field-verdeling te verkrijgen zijn gemiddeld ca. 20 deeltjes per aktief vak gewenst, dus ca. 5000 deeltjes in het hele gebied. Totaal moeten dus 20000 deeltjes worden geloosd en zijn er gemiddeld 10000 in de berekening. De gespuidde deeltjes kunnen echter van alle operaties worden uitgesloten, zodat het om minder gaat, maar toch niet veel minder dan de uiteindelijk aanwezige 5000. Het aantal verplaatsingen is dus ongeveer $5000 \times 3 \times 365 \times 86400 : 12000 = 39420000$ en de benodigde CPU-tijd ca. 11 uur

(nog iets meer vanwege het tweede-orde-rekenschema). Dit wat moeilijk te aksepteren getal kan aanzienlijk worden verminderd door toepassing van een bijzondere techniek die in paragraaf 4.8 wordt beschreven.

Een aanvullende near field-berekening (al of niet in dezelfde run opgenomen) met een 80-voudig deeltjes-debiet vereist slechts enkele dagen simulatietijd, zeg 3. Dit leidt tot een aantal verplaatsingen van $\frac{1}{2} \times 80 \times \left(\frac{20000}{3 \times 365} \times 3 \right) \times \frac{3 \times 86400}{12000} \approx 47340$ en een CPU-tijd van slechts ca. 50 s! Er ontstaat een wat merkwaardige verhouding tussen aantal tijdstappen en aantal deeltjes: per tijdstap worden ca. 200 deeltjes geloosd. Er is in de programmatuur echter een voorziening om de deeltjes gespreid over de tijdstap te lozen (par. 5.3).

4.8. Speciale technieken ter verkorting van rekestijden

4.8.1. Voorzover men hieronder ook wil verstaan de toepassing van hogere-orde-rekenschema's voor het berekenen van verplaatsingen, zij volstaan met verwijzing naar par. 4.5.1. en de daar genoemde en andere relevante literatuur.

4.8.2. Praktisch gesproken is er alleen een rekestijdenprobleem bij continue lozingen van langlevende stoffen, in het bijzonder als ook de equilibratietijd van het ontvangende systeem lang is.

Daar de criteria voor het bepalen van de (maximaal toelaatbare) tijdstap in feite voor elk tijdstip dezelfde zijn, is er geen (verdere) winst te behalen door de tijdstap gedurende de berekening te veranderen. Mogelijke winst zal gezocht moeten worden in de sfeer van de deeltjesaantallen

4.8.3. In de voorgaande paragraaf bleek al dat men een near field-struktuur, welke steeds korrespondeert met relatief korte tijdschalen, kan uitrekenen in een fractie van de tijd welke benodigd is voor het totale gebied, zelfs met een tachtigvoudig deeltjesdebiet. Dit is reeds een (zo men wil wat triviaal) voorbeeld van bezuiniging op rekestijd. Immers, stel men zou in verband met de wens de near field-struktuur op te lossen het tachtigvoudige debiet aanhouden voor de berekening van het totale veld !

4.8.4. Spektakulair is de winst die behaald kan worden door gebruik van een superpositietechniek. Deze is optimaal toepasbaar in een zuiver stationaire situatie(*). De beschrijving in dat geval is eenvoudig. De overweging is dat het gedrag van een (momentaan geloosde) wolk deeltjes tengevolge van de onveranderlijkheid van het deterministische veld en de konstantheid van het statistisch gemiddelde van de toegevoegde verplaatsingen, bij voldoende aantal deeltjes reproduceerbaar is. Deze reproduceerbaarheid is des te groter, naarmate men meer deeltjes per wolk neemt. De superpositiegedachte is nu, de continue lozing opgebouwd te denken uit een (groot) aantal momentlozingen, die mits het aantal deeltjes per wolk niet te klein is, herhalingen zijn van één momentlozing. Men hoeft zo'n momentlozing dus maar éénmaal door te rekenen en vervolgens de momentane verdelingen ervan voor een groot aantal tijdstippen bij elkaar op te tellen. Hoe groter dit aantal, hoe korrekter (vloeiender) is de benadering van de beoogde continue lozing. Extra rekentijd is met het opslaan en vervolgens samenstellen van een steeds groter aantal momentopnamen van de éénmalige momentlozing hoegenaamd niet gemoeid, maar men komt zonder bijzondere voorzieningen wel vrij spoedig in problemen met geheugenruimte. Hiervoor zijn allerlei oplossingen mogelijk; hieronder wordt een drietal genoemd.

I Iedere momentopname wordt, voordat wordt doorgedaan met het berekenen van de verdere evolutie van de basiswolk direct omgezet in een telling van de aantallen deeltjes in de vakjes van het telrooster (zie par. 8.). Het telresultaat wordt toegevoegd aan de som van de tellingen van de voorgaande stadia.

II Men laat het aantal bewaarde momentopnamen van de basiswolk per tijdsperiode, geleidelijk afnemen met de leeftijd van de wolk. Immers een hoge frekwentie van opéénvolging is alleen van belang voor een vloeiende weergave van wat recent is geloosd; oude wolken overlappen elkaar altijd wel in voldoende mate. Uiteraard moet bij deze methode een deeltjesgewicht in rekening worden gebracht dat omgekeerd evenredig is met het aantal mo-

(*) Onverkorte toepassing in niet-stationaire situaties is alleen mogelijk als het (deterministische) snelheidsveld homogeen is. De beschrijving is dan minder eenvoudig (zie o.a. lit. 2 en 7).

mentopnamen per tijdseenheid.

III Men bouwt de continue lozings-verdeling niet op uit momentopnamen van een momentlozing, maar uit de evolutiestadia van een beperkte continue lozing. Houdt men bij het in par. 4.7. beschreven geval van het IJsselmeer het totale aantal deeltjes op 20000, dan kan men deze verzameling bij voorbeeld opbouwen uit 20 of 200 ontwikkelingsstadia van een aanvankelijke verdeling die ontstaat door respektievelijk gedurende het twintigste of het tweehonderdste deel van de gewenste periode met het oorspronkelijke debiet te lozen, dus totaal respektievelijk 1000 of 100 deeltjes. De winst in rekentijd bedraagt respektievelijk een faktor 20 of 200 (de bijdrage voor het superponeren is verwaarloosbaar). De kleinste van deze factoren voert al tot een akseptabele tijd en verdient waarschijnlijk enige voorkeur vanwege een betere "statistiek".

4.8.5. Methode III kan ook worden toegepast in het geval van een zuiver periodiek veld, maar met de duidelijke beperking dat de basislozing minimaal één periode moet duren. Een groter (geheel) aantal perioden is uiteraard ook goed, maar levert alleen maar meer werk en waarschijnlijk een niet of nauwelijks waarneembare verbetering. In een fijnmazig model van een getijgebied kan men zonder één of andere vorm van superpositie het opbouwen van een evenwichtstoestand wegens de korte tijdstap wel vergeten. Als voorbeeld nemen we weer het 400m-model van de Westerschelde. Voor het bereiken van een evenwichtstoestand (zeg door een lozing bij Borssele) moet voor een konservatieve stof een periode van ongeveer een half jaar gerekend worden, dus ca. 350 M2-perioden of ca. 175 perioden als men de dagelijkse ongelijkheid in rekening wil brengen. Een geschikt aantal deeltjes lijkt 35000 (men moet er mee rekenen dat na een half jaar meer dan de helft zich op zee zal bevinden). Per periode en dus als aantal in de basis-verzameling 100 of 200 deeltjes. De winst in rekentijd bedraagt respektievelijk een faktor 350 of 175. Dit is ook hard nodig want 100 deeltjes met een tijdstap van 200 sekonden een half jaar volgen betekent reeds $100 \times 350 \times 44700 : 200 = 7822500$ deeltjesverplaatsingen, dus een CPU-tijd van ruim 2 uur. Een basisperiode van twee M2-perioden vergt het dubbele en is misschien nog aanvaardbaar; een springtij-doodtij-cyklus zou met een

supercomputer nog mogelijk zijn, maar het doorrekenen van de hele equilibratieperiode zonder superpositie moet wel als een onmogelijke zaak beschouwd worden.

Men bedenke dat wanneer de basisperiode bij voorbeeld loopt van hoogwater tot hoogwater, het eindresultaat de toestand op het moment van hoogwater voorstelt. Voor een andere toestand, bij voorbeeld laagwater moet feitelijk het hele proces herhaald worden, al zou (naar analogie van wat volgt in 4.8.6.) nog wel wat bezuinigd kunnen worden.

4.8.6. Een aantal van 100 deeltjes per M2-periode is uiteraard totaal onvoldoende om een beeld van de near field-situatie op te bouwen. Hiertoe kan men echter een recent tijdbestek met een veel groter deeltjesdebiet doorrekenen, eventueel kan men nog een meest recent tijdsinterval afsplitsen met een nóg groter debiet. Alles weer met inachtneming van aangepaste deeltjesgewichten.

Op analoge wijze kan men voor het onderzoeken van meer specifieke situaties van tijdelijke aard ook volstaan met het apart doorrekenen van een beperkte tijdsduur en voor de bijdragen van minder recente perioden een soort van gemiddelde toestand aanhouden.

4.8.7. De beschouwing over evenwichtstoestanden en superpositie is in beginsel niet specifiek voor deeltjesmodellen; voor een e.d.-model zou een analoge redenering gelden, maar er is een belangrijk verschil in de konsekventies voor de rekestijd, zelfs wanneer men de rekenvakken waar nog geen geloosde materie is aangeland van de berekening zou uitsluiten. Deeltjesmodellen lijken hier in het voordeel, althans voor periodieke evenwichtssituaties. Voor volledige evenwichtstoestanden hebben e.d.-modellen weer een specifieke mogelijkheid, namelijk het geheel tijdonafhankelijk oplossen van de transportvergelijking (matrix-inversie).

5. Randbehandeling

5.1. Gesloten randen

In de gegeven snelheidsmatrices zijn de snelheidscomponenten

loodrecht op de gesloten randen nul. Er wordt altijd wel zodanig geïnterpoleerd dat in het afgeleide veld deze eigenschap behouden blijft. Bij rechte randen worden de tangentiële snelheidscomponenten overal samengesteld met loodrechte componenten die nul zijn (figuur 17^a). Dit heeft tot gevolg dat weinig deeltjes door de rand heen op het land gezet worden. In theorie kan dit gebeuren als gevolg van de eindige tijdstap: op enige afstand van de rand kan de snelheidsvektor wel een hoek maken met de kustlijn. Verder kan op een hoek (van 270°) door samenstelling van twee tangentiële componenten een landinwaartse gerichte snelheidsvektor ontstaan (fig. 17^b). Dit is geen doorslaggevende reden om bij het afleiden van het snelheidsveld uit de gegeven matrices een "no slip"-voorwaarde in te voeren. Want ook door andere oorzaken kunnen deeltjes "op het land" terecht komen, voornamelijk door toegevoegde mechanismen zoals random walk, maar zoals gezegd bij uitzondering ook bij rechte randen; verder (minder uitzonderlijk) in de buurt van een hoek van 90° (figuur 17^c).

Omdat deeltjes dus door verschillende oorzaken in een "droog vak" kunnen belanden, moet er een voorziening zijn waardoor na iedere tijdstap deze deeltjes worden teruggebracht in het water. Het logische schema van zo'n voorziening kan kort samengevat luiden (zie figuur 18^a)

- Is het vak waarin het deeltje D zich bevindt (gearceerd in de figuur) "nat"? (zo ja: klaar)
- Zo neen, zijn één of meer van de vakken 1, 2, 3, 4 nat?
- Zo ja, verplaats het deeltje naar zijn gespiegelde positie t.o.v. de dichtsbijzijnde scheidingswand met een nat vak (fig. 18^b)
- Zo neen, zijn één of meer van de vakken 5, 6, 7, 8 nat?
- Zo ja, spiegel via het dichtsbijgelegen hoekpunt dat aan zo'n nat vak raakt (fig. 18^c).

Bij afwezigheid van droogvallende gebieden dient het geval dat D zich in een vak bevindt dat door 8 droge vakken wordt omringd, te zijn uitgesloten door passende keuze van dt (zie ook par. 4.5.3). Indien wel gebieden droogvallen kan desgewenst een extra "ronde" worden toegevoegd als blijkt dat een deeltje geheel door droge vakken omringd is geraakt. De kans dat dit gebeurt kan worden verkleind door de reflektieprocedure steeds toe te passen vóór de stap

van het droogvallen (en eventueel daarna nog een keer).

5.2. Open randen

Stroomt alleen water naar buiten, dan is de zaak eenvoudig. Deeltjes die door de open rand het modelgebied verlaten worden niet gereflekteerd, maar uit de berekening genomen. Of dit met het korrekte deeltjes-debiet gebeurt, wordt bepaald door de voorzieningen met betrekking tot de continuïteitsvoorwaarde voor de vloeistof (par. 2), waarbij eventueel in de vakken waarin de deeltjes na het passeren van de open rand terecht komen nog een snelheidsveld gedefiniëerd kan worden, aansluitend op het veld in het eigenlijke modelgebied.

Stroomt alleen water naar binnen, dan gaan er geen deeltjes naar buiten, tenzij (in een uitzonderlijk geval) door "diffusie" tegen de stroom in. Dit is desgewenst te voorkomen door de desbetreffende rand voor wat betreft de reflektieprocedure als gesloten te definiëren. Er komen ook geen deeltjes naar binnen, tenzij de waterinlaat tevens als deeltjesbron fungeert. In dat geval is er geen wezenlijk verschil met andere deeltjesbronnen.

Wanneer afwisselend water in- en uitstroomt, zoals bij een open getijrand, moeten voorzieningen getroffen worden voor een zo korrek mogelijk deeltjesconcentratie bij instroming. De overgangen daarbij zijn dezelfde als bij andere waterkwaliteitsmodellen. Daar de behoefte zich tot dusverre nog niet voordeed, zijn er momenteel nog geen deeltjes-programma's die in dit geval voorzien.

5.3. Bronnen

Ter plaatse van een bron van deeltjes worden de (nieuwe) deeltjes zonder meer gedeclareerd, hetzij éénmalig (momentbron), hetzij gespreid in de tijd (kontinue bronnen). In de bestaande programma's kan de bronsterkte in de tijd gevarieerd worden en ook is er een voorziening om deeltjes gespreid over een tijdstap te introduceren. Daarbij wordt voor elk deeltje de duur van de eerste tijdstap aangepast, zodanig dat het deeltje bij de tweede en alle volgende tijdstappen in de pas loopt. Dit laatste maakt dat het niet nodig is de tijdstap te verkleinen als men in de omgeving van de bron zo korrek mogelijk wil detailleren.

Er zijn momenteel nog weinig speciale voorzieningen voor verschillende vormen van een bron. Een lijnbron moet bij voorbeeld worden samengesteld uit een aantal op het gewenste lijnstuk gelegen puntbronnen.

6. Afregeling

Afregeling van deeltjesmodellen zal in het algemeen berusten op waarnemingen van concentratieverdelingen in het prototype, zoals van natuurlijke stoffen, van geloosde afvalstoffen of warmte, of van bij experimenten ingebrachte merkstoffen. Tot dusverre zijn alleen modellen afgeregeld met behulp van momentlozingen van merkstoffen. Wel is in het Westerscheldemodel vastgesteld dat voor lange tijden (ééndimensionaal gedrag) goede overeenstemming optreedt met de uit de zoutintrusie bekende longitudinale dispersiecoëfficiënten.

De parameters die kunnen worden aangepast zijn de parameters v_c , α_0 , τ_λ en p uit formule (4) en/of de a_j en λ_j uit formule (5). Aan het gebruik van een anisotropiefactor ($\epsilon_j \neq 1$) of aan extra random-verplaatsingen in richtingen gelijk en tegengesteld aan de stroming van het gegeven veld (zie lit. 16, en par. 3.1., einde eerste alinea) bestond tot dusverre geen behoefte.

7. Afbraak en reacties

Eenvoudige exponentiële afbraak door radioactief verval, monomoleculaire reacties, biochemische oxydatie en warmteafgifte aan de atmosfeer kan uiteraard zeer eenvoudig in rekening gebracht worden door de deeltjesgewichten met $e^{-\frac{t_L}{\tau}}$ te vermenigvuldigen (t_L de leeftijd van het deeltje, τ de tijdconstante). Bij warmteafgifte kan in plaats van met een vaste tijdconstante eventueel gewerkt worden met de fraktie dt/τ_h per tijdstap waarin τ_h van de momentane lokale waterdiepte afhangt.

Om meer gekompliceerde reacties te beschrijven moet niet slechts aan het eind van een berekening, maar bij elke tijdstap een deeltjestelling plaatsvinden om verzamelingen van deeltjescoördinaten te vertalen naar concentraties. Ervaring is op dit moment nog

niet aanwezig.

8. Nabewerking en presentatie

Voor kwalitatieve presentaties worden wolken, pluimen en andere deeltjesdistributies wel geplot door middel van een puntje of driehoekje voor elk deeltje (figuren 19A, B,...). Voor kwantitatieve weergave worden op de gewenste tijdstippen de deeltjes geteld binnen de vierkanten van een telrooster waarvan de fijnheid afhangt van het gewenste oplossend vermogen. Uiteraard moet tevoren het juiste deeltjesdebiet worden gekozen om op het gewenste rooster voldoende deeltjes per vierkantje te krijgen.

De verkregen aantallen (of na in rekening brengen van de diepte: concentraties) kunnen als matrices worden geprint, of worden afgebeeld in een tekening op schaal.

Een volgende stap is, de telresultaten aan een isolijnenprogramma te onderwerpen. Een resultaat is weergegeven in figuur 20. Deze laatste stap is uiteraard niet specifiek meer voor deeltjesmodellen, behalve door het feit dat het telrooster een onderverdeling kan zijn van het rooster van het w.b.m., dat men nog wel terugvindt in de oever-vormen (figuur 21).

Een in de praktijk ondervonden moeilijkheid was het black box-karakter van een beschikbaar isolijnenprogramma, waardoor modificaties (zoals aanpassing aan de eisen voor het gedrag van isokoncentratielijnen bij oevers) niet mogelijk waren, evenmin als samenbouw met andere programmodulen. Het is tot dusverre nog niet gelukt de isolijnenvoorzieningen uit het WAQUA-pakket te adopteren.

9. Literatuur

1. Csanady, G.T., Turbulent diffusion in the environment.
D. Reidel Publishing Co., Dordrecht/Boston, 1973.

2. Dam, G.C. van, Horizontaal-tweedimensionale wiskundige modellen met betrekking tot de dispersie in turbulente wateren van opgeloste stoffen, zwevende stoffen, warmte, bacteriën etc., in het bijzonder modellen volgens de zogenaamde superpositiemethode.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging, Fysische Afdeling, nota FA 7302, 1973.
3. Dam, G.C. van, Scale dependent dispersion of distinct particles in an artificial eddy field.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging, Fysische Afdeling, rapport 07 80-FA, 1980.
4. Dam, G.C. van, De random walk-term in het deeltjesmodel.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging, Fysische Afdeling, rapport 04 80-FA, 1980.
5. Dam, G.C. van, Sub-grid-structuur van het snelheidsveld bij deeltjessimulatie.
Paragraaf 4.2.4 in Waterbeweging en menging in het zuidelijk gedeelte van de Noordzee, eindverslag MLTP-4 van de Raad van Overleg voor het fysisch-oceanografisch onderzoek van de Noordzee, 1974-1980.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging, nota FA 8005, 1980.
6. Dam, G.C. van, Distinct-particle simulations.
Paragraaf VIII van Chapter 2 in Pollutant transfer and transport in the sea, G. Kullenberg ed., vol. I.
CRC Press Inc., Boca Raton, Florida, 1982.
7. Dam, G.C. van, Superposition and continuous sources.
Paragraaf VI van Chapter 2 in Pollutant transfer and transport in the sea, G. Kullenberg ed., vol. I.
CRC Press Inc., Boca Raton, Florida, 1982.
8. Dam, G.C. van, Konstante en aangroeiende random-stap in deeltjesmodellen.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging, Fysische Afdeling, notitie 85-FA-219, 1985.

9. Dam, G.C. van, Numerieke fout bij baanberekening in 2 dimensies met het eenvoudige schema $ds = vdt$.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging,
Fysische Afdeling, notitie 85-FA-252, 1985.

10. Dam, G.C. van, Aspecten van tweedimensionale transportberekeningen voor oppervlaktewater door middel van passieve deeltjes-simulatie.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging,
Fysische Afdeling, nota FA 8504, 1985.

11. Dam, G.C. van, Het probleem van het afleiden van continue snelheidsvelden uit op roosters gegeven componenten. Het stationaire geval.
Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging,
Fysische Afdeling, notitie 85-FA-298, 1985.

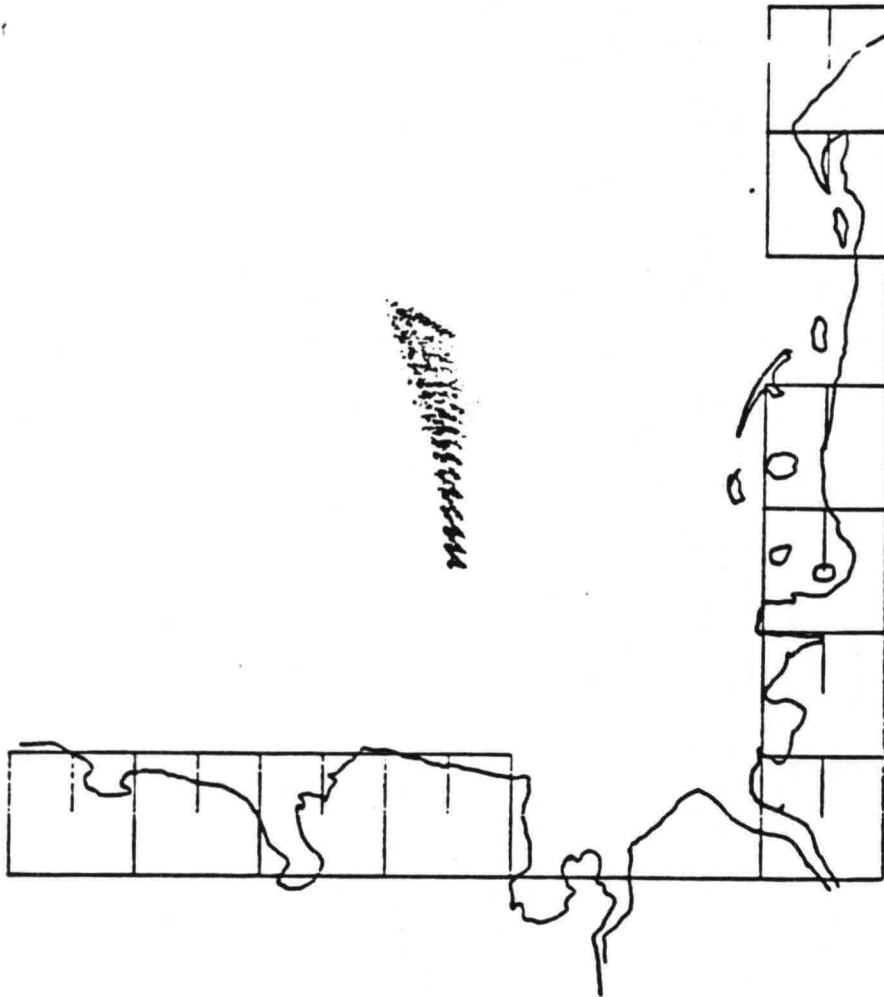
12. Dam, G.C. van, en W.A.M. de Jong, The construction of a two-dimensional mass conserving velocity field on an arbitrarily fine rectangular grid from given components on a coarse grid.
Publikatie in bewerking, 1986.

13. Einstein, A., Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen.
Ann. Phys. (Leipzig), 4, 17, 1905.

14. Gerritsen, H., Some first particle track computations with fine grid and coarse grid velocity fields of the Southern North Sea.
Bijdrage aan colloquiumdag Fys. Afd. RWS, 19 juni 1985.
Waterloopkundig Laboratorium Delft, DHL-publication no. 351, 1985.

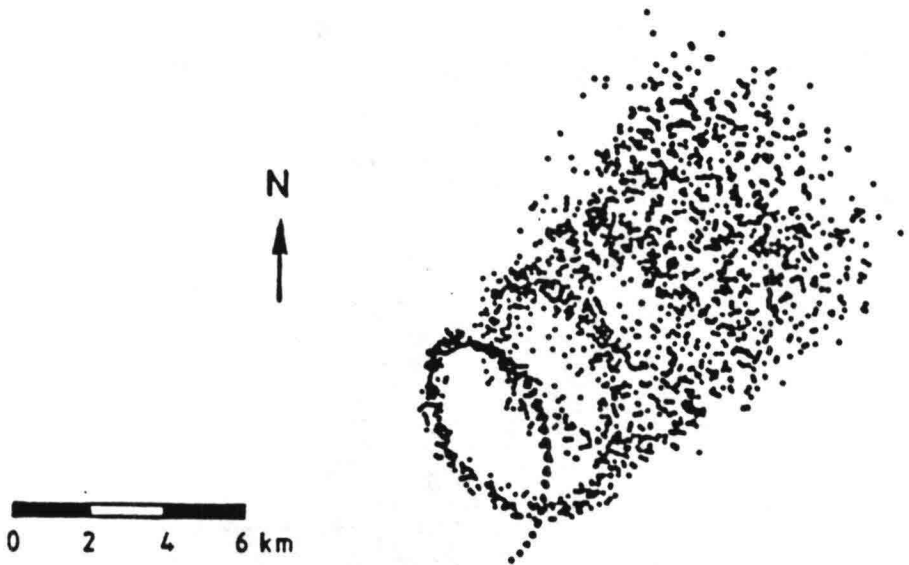
15. Joseph, J., en H. Sendner, Über die horizontale Diffusion im Meere.
Deutsche Hydrogr. Zeitschr., 11, 2, 1958.

16. Maier-Reimer, E., Hydrodynamisch-numerische Untersuchungen zu horizontalen Ausbreitungs- und Transportvorgängen in der Nordsee. Dissertatie, Mitt. Inst. für Meereskunde der Universität Hamburg, XXI, 1973.
17. Meijer, K.L. (met bijdragen van G.C. van Dam, L. Postma en G.K. Verboom), Berekening waterbeweging en waterkwaliteit met behulp van supercomputers. Waterloopkundig Laboratorium, Delft, rapport S 574, 1983.
18. Okubo, A., A new set of oceanic diffusion diagrams. Tech. Rept. 38, Ref. 68-6, Chesapeake Bay Institute, The Johns Hopkins University, Baltimore, 1968.
19. Pasmanter, R.A., Two-dimensional random walk. Rijkswaterstaat, Directie Waterhuishouding en Waterbeweging, Fysische Afdeling, notitie 79-FA-010, 1979.
20. Riepma, H.W., Current meter records and the problem of the simulation of particle motions in the North Sea near the Dutch coast. Oceanologica Acta, januari(?) 1986. (accepted for publication)
21. Lambert, J.D., Computational methods in ordinary differential equations. Wiley, London-New York, 1973.



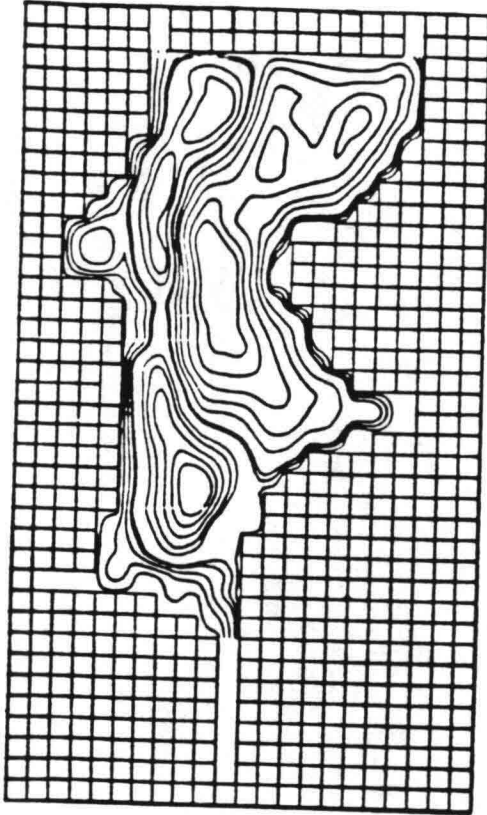
Figuur 1
(uit lit. 16)

Abb.20.2 Transport und Diffusion nach Monte-Carlo-Verfahren
aus konstanter Quelle bei M_2 -Gezeit und 14 m/sec
Nord-West-Wind über der Nordsee in 20 Perioden
 $P = 0, Q = 2$

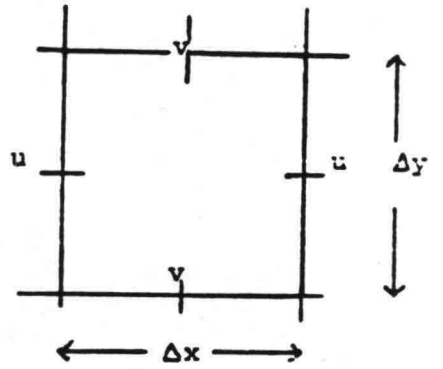


Figuur 2

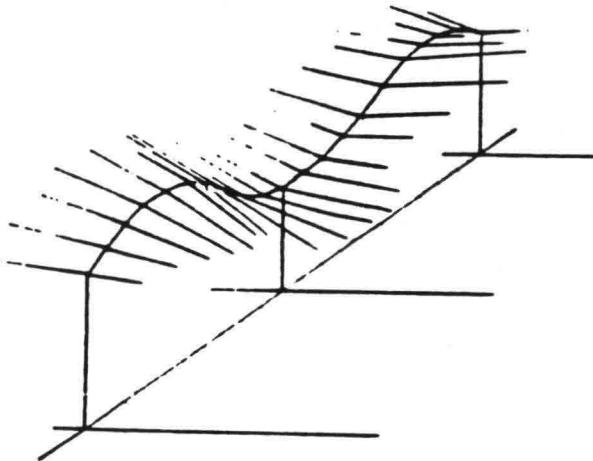
N.W. gedeelte zuidelijke Noordzee
Geen wind
5 getijperioden (M_2)



Figuur 3



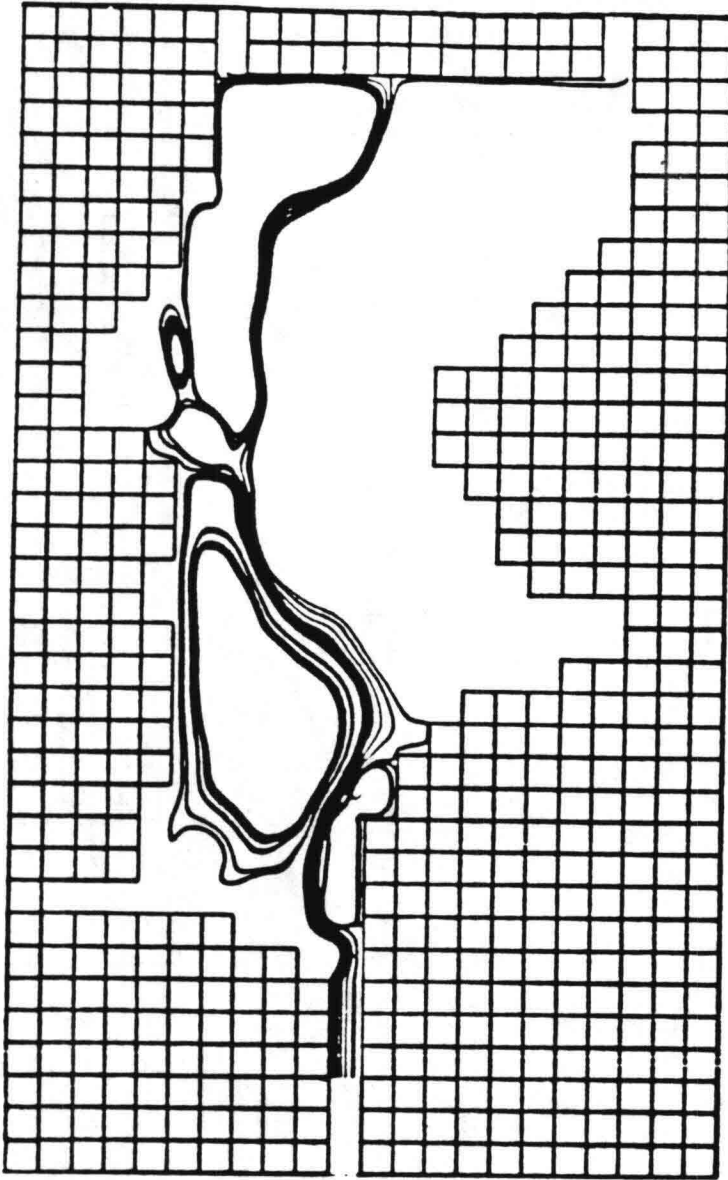
Figuur 4



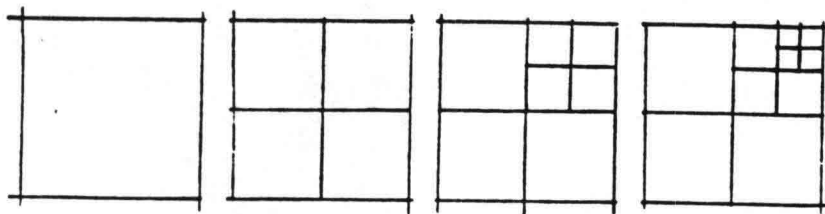
Figuur 5



Figuur 6

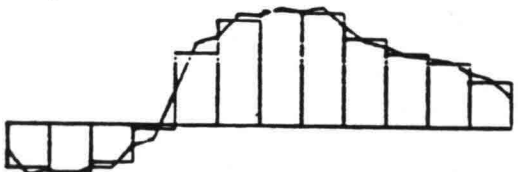
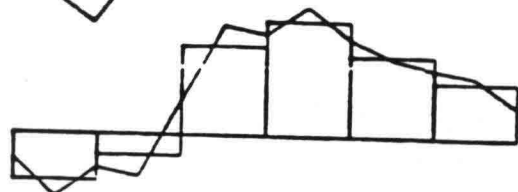
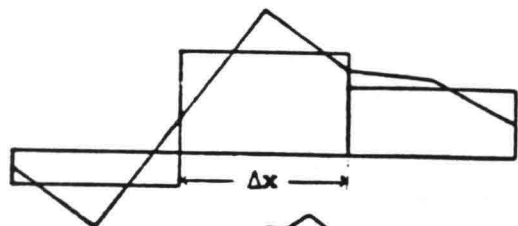
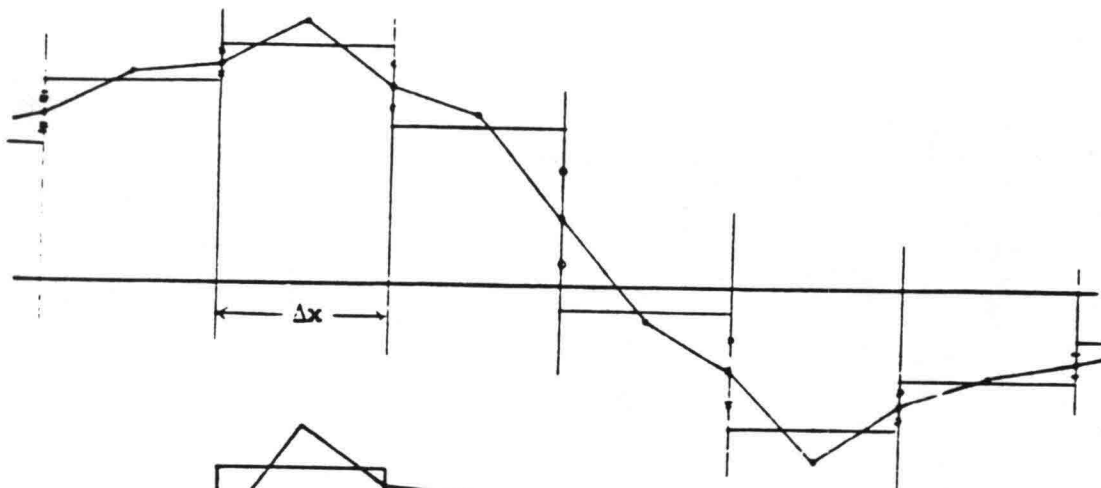


Figuur 7

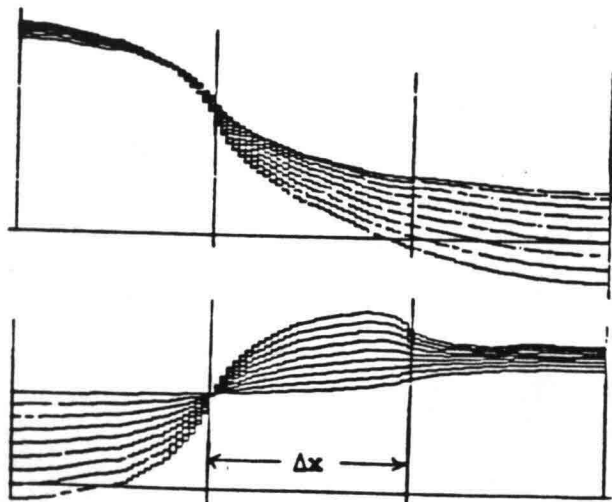


enz.

Figuur 8



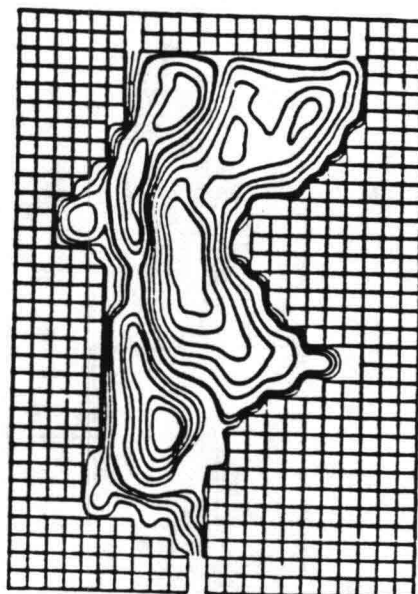
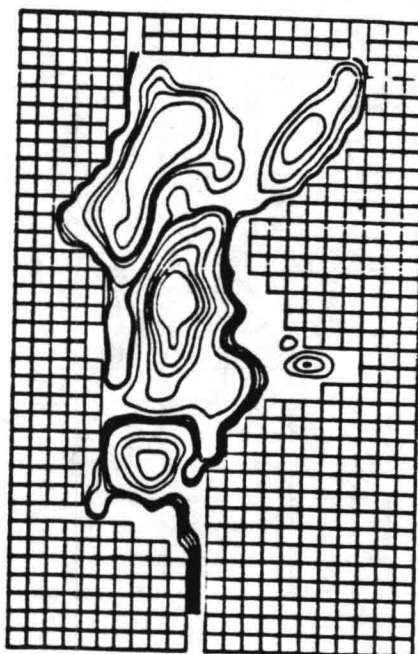
Figuur 9



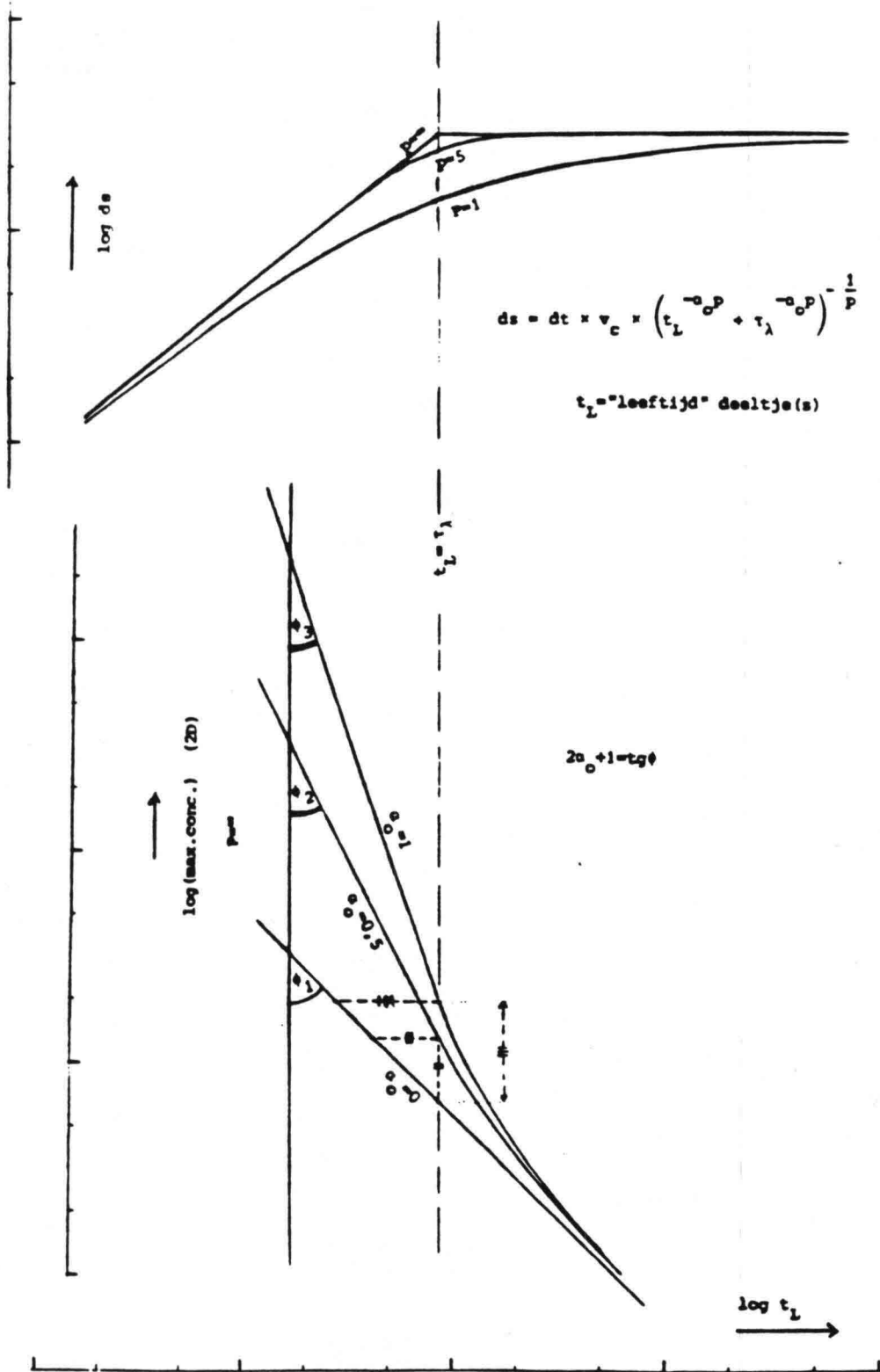
Figuur 10

Δx en Δy gedeeld door 32. Snelheidsprofielen op onderlinge afstanden $\Delta x/8$.

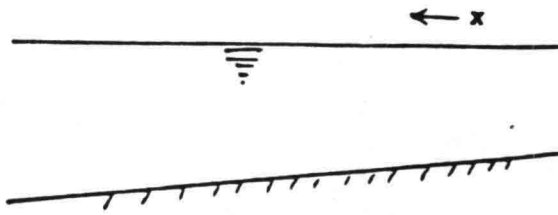
Figuur 11



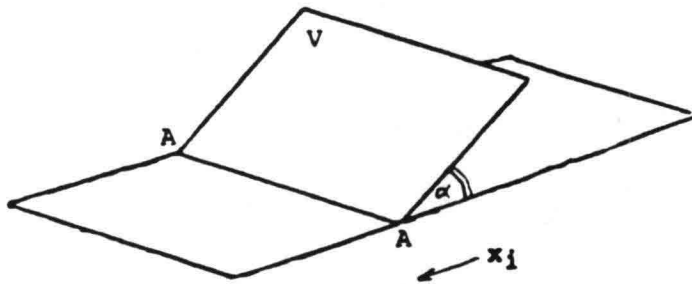
Figuur 12



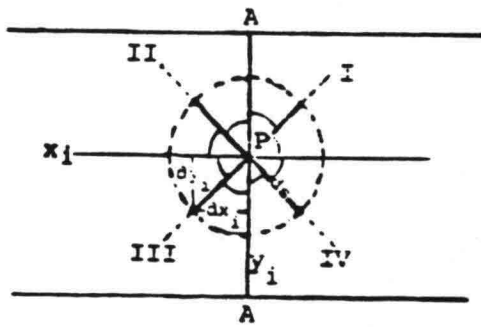
Figuur 13



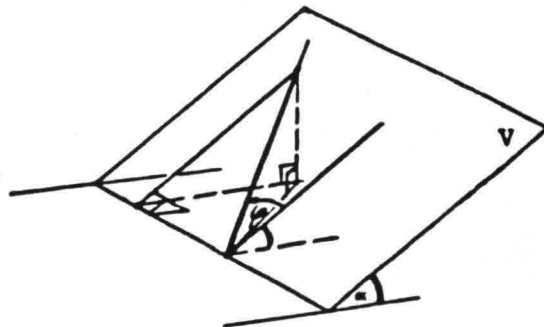
Figuur 14



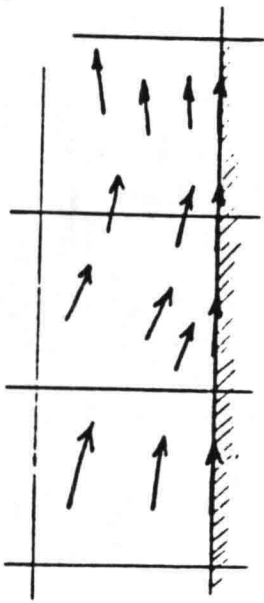
Figuur 15A



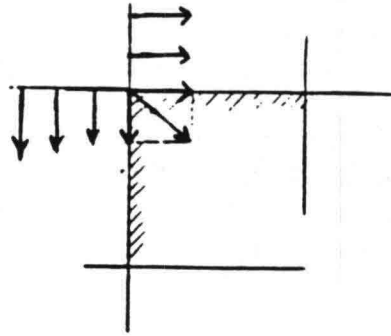
Figuur 15B



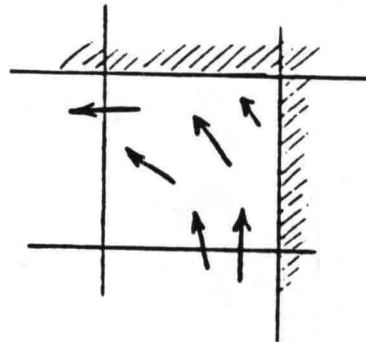
Figuur 16



Figuur 17A



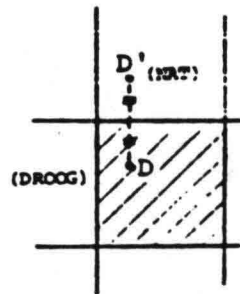
Figuur 17B



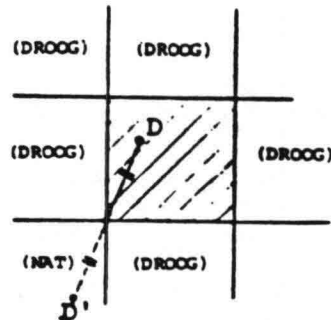
Figuur 17C

	5	2	6
1	D _o	3	
8	4	7	

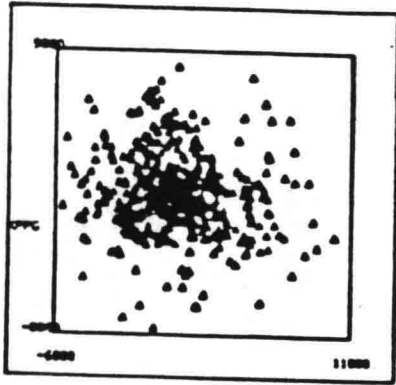
Figuur 18A



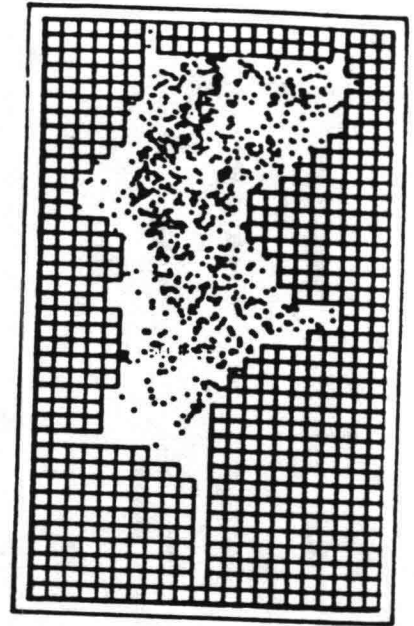
Figuur 18B



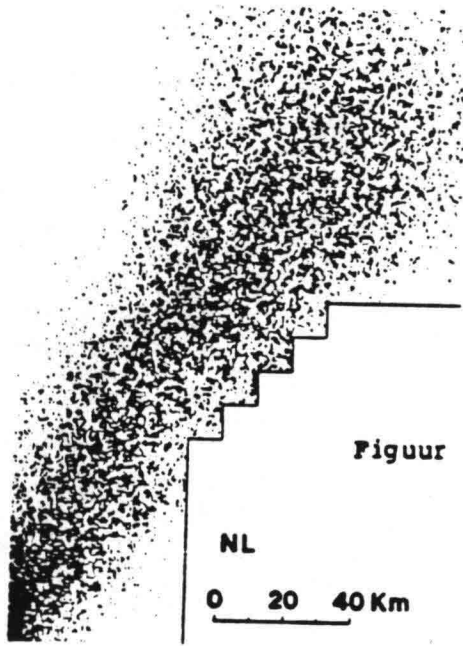
Figuur 18C



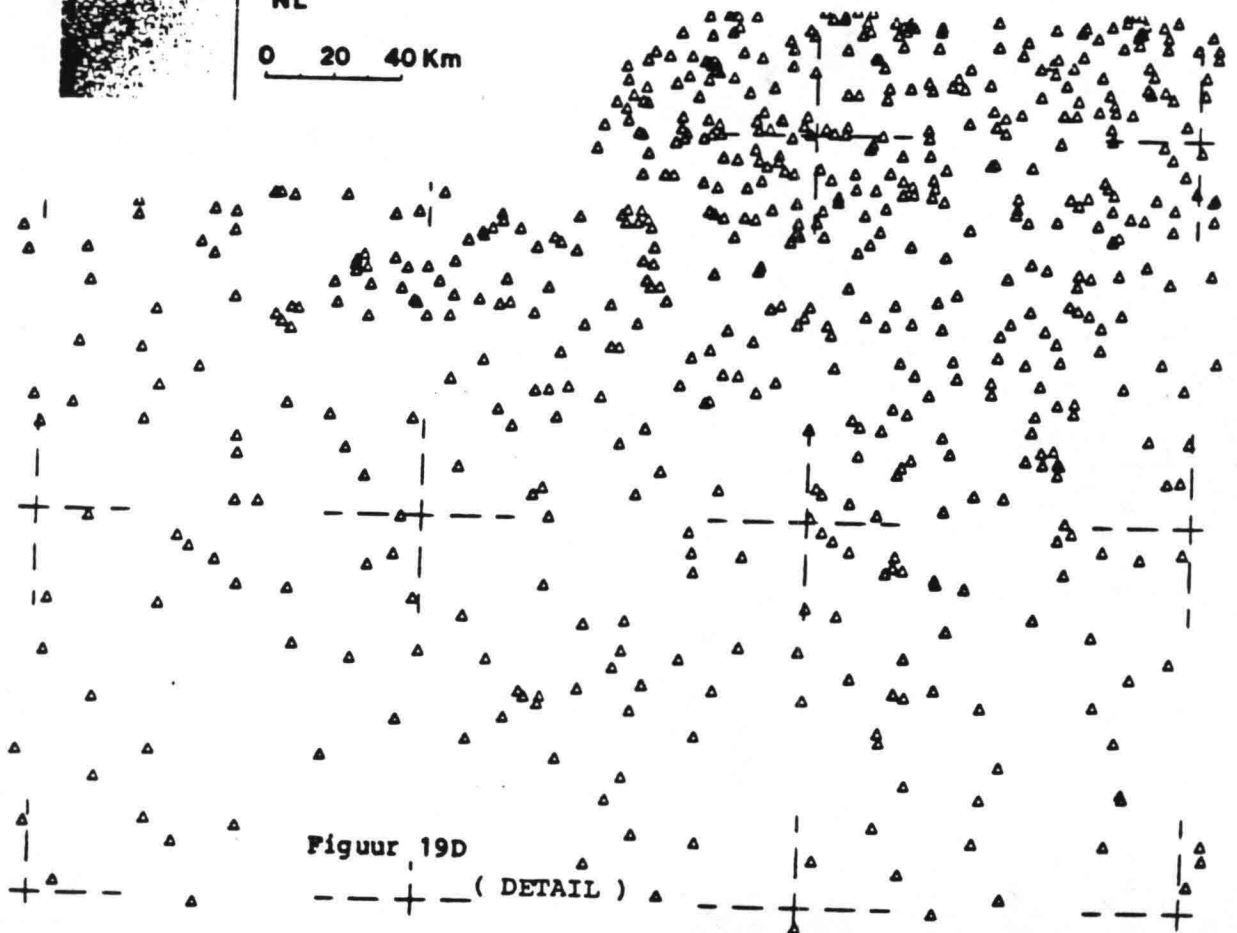
Figuur 19A



Figuur 19B

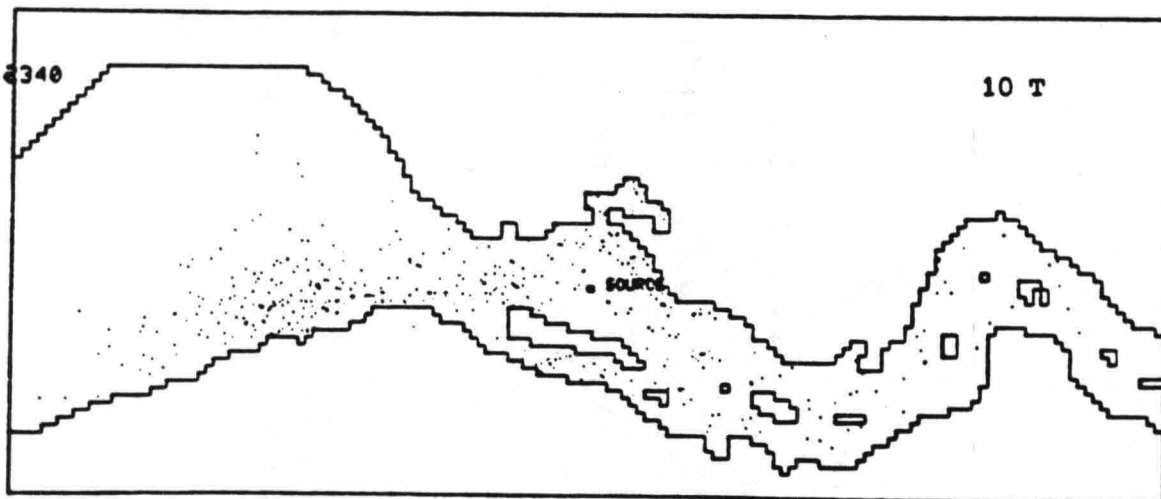
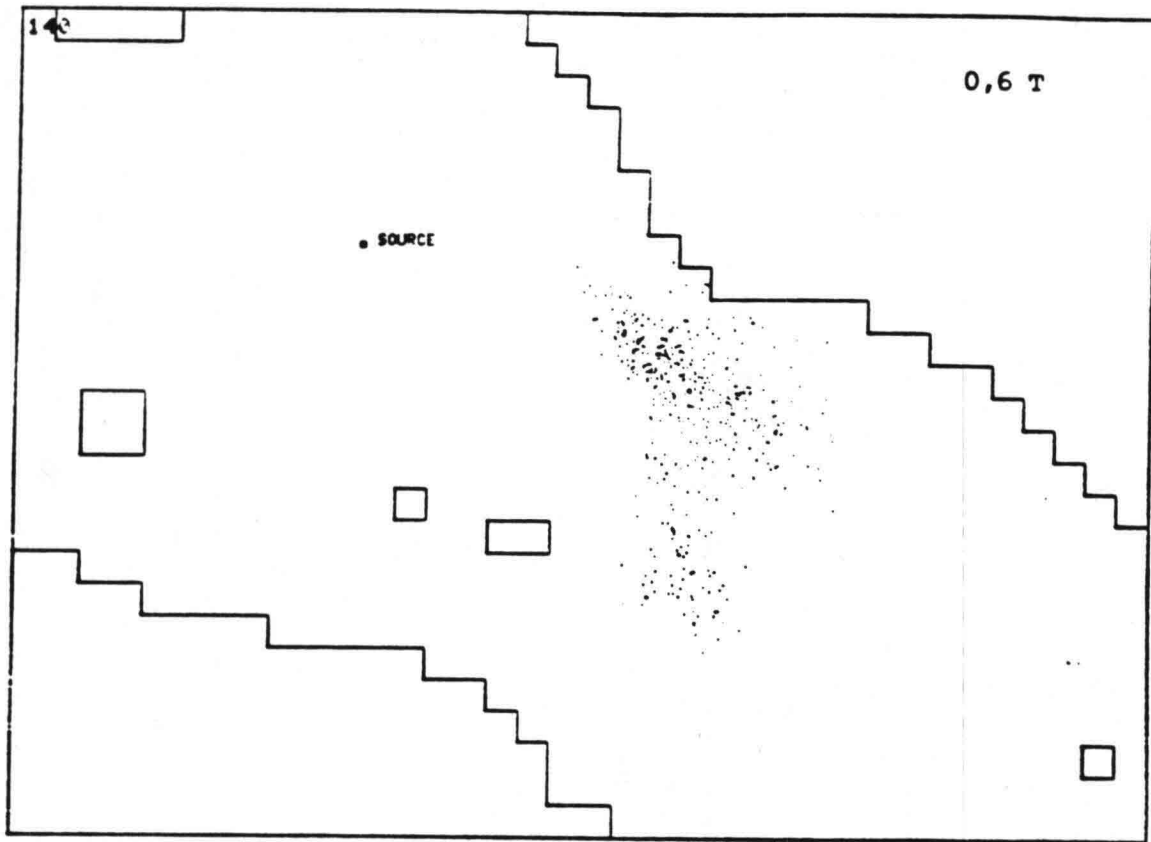


Figuur 19C



Figuur 19D

(DETAIL)



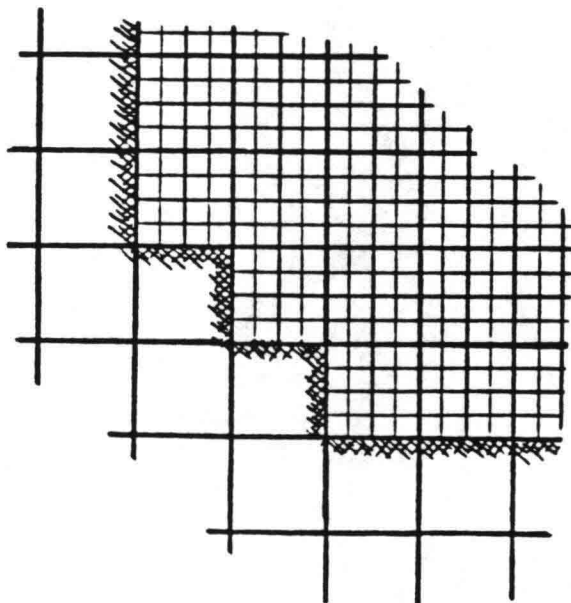
Figuur 19E



Figuur 20

11200 deeltjes
800 tijdstappen
ca. 12,5 getijperiodes
maas telrooster 500 m
maas w.b.m. 10 000 m

(Noordzee, getijstroomveld)



Figuur 21

