

Opdrachtgever:

Rijksinstituut voor Kust en Zee/RIKZ

WAQUA – Delft3D online morfologie koppeling

Eindrapport

november 2005

Opdrachtgever:

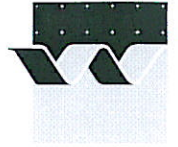
Rijksinstituut voor Kust en Zee/RIKZ

WAQUA – Delft3D online morfologie koppeling

dr.ir. H.R.A. Jagers

Eindrapport

november 2005



OPDRACHTGEVER:	Rijksinstituut voor Kust en Zee/RIKZ				
TITEL:	WAQUA - Delft3D online morfologie koppeling				
SAMENVATTING:	<p>Dit rapport beschrijft de werkzaamheden uitgevoerd door WL Delft Hydraulics met assistentie van VORtech Computing hetgeen geresulteerd heeft in een prototype-koppeling van WAQUA met de online sedimenttransport- en morfologie-module van Delft3D-FLOW. Het achterliggende doel van deze activiteit was het mogelijk maken van een grondige test van de backbone, niet met het oog op de OMS backbone als IT product, maar als test van de nagestreefde openheid van het OMS systeem waarbij de backbone voor de data-uitwisseling wordt gebruikt. Dit rapport omvat het functioneel ontwerp, het technisch ontwerp en een beschrijving van de uitgevoerde geschematiseerde en realistische testcases voor rivier-toepassingen.</p> <p>De koppeling is gerealiseerd door de Delft3D-FLOW code aan te passen zodanig dat de waterbeweging door een externe bron toegeleverd kan worden via de OMS backbone en de aangepaste bodemligging via de backbone aan een andere executable kan worden geleverd. De WAQPRO code is aangepast zodanig dat deze een aangepaste bodemligging kan ontvangen van de OMS backbone en de berekende waterbeweging kan uitvoeren naar de backbone. De aanpassingen in WAQPRO zijn zodanig uitgevoerd dat de koppeling zowel voor WAQUA als voor TRIWAQ met één laag werkt.</p> <p>Aan de hand van een testcase met een recht kanaal met een zich in benedenstroomse richting verplaatsende kuil (“trench”) worden de verschillende cruciale stappen in de implementatie besproken. Een testcase met een 60 km lang model van de Waal toont aan dat de koppeling goed gaat in combinatie met overlaten en trachytopen (in SIMONA termen: ecotopen) formuleringen voor een groot model voor lange termijn morfologische ontwikkeling bij constante afvoer. Een uitbreiding van de Maasdemo testcase met morfologie toont aan dat de koppeling ook werkt voor een dynamisch doorgerekende hoogwatergolf.</p> <p>In het algemeen kan worden gesteld dat de OMS backbone goed voldoet voor de hier gerealiseerde één op één koppeling. De resultaten van de gekoppelde programmatuur komt door het goed afstemmen van de invoer van beide modelsystemen goed overeen met de resultaten van een simulatie van een standalone Delft3D-FLOW simulatie met morfologie.</p>				
REFERENTIES:	RIKZ project: RIKZ-1572				
VER	AUTEUR	DATUM	OPMERK.	REVIEW	GOEDKEURING
1.0	H.R.A. Jagers	nov. 2005		E.A.H. Vollebregt	F.M.J. Hoozemans
PROJECTNUMMER:	M3822				
TREFWOORDEN:	wiskundige modellen, software, open model systems (OMS), riviermorfologie				
AANTAL BLADZIJDEN:	59				
VERTROUWELIJK:	<input type="checkbox"/> JA		<input checked="" type="checkbox"/> NEE		
STATUS:	<input type="checkbox"/> VOORLOPIG		<input type="checkbox"/> CONCEPT		<input checked="" type="checkbox"/> DEFINITIEF

Inhoud

1	Inleiding	1
2	Functioneel ontwerp	2
2.1	Inleiding	2
2.2	Functioneel ontwerp op hoofdlijnen	2
2.3	Functioneel ontwerp aanpassingen Delft3D-FLOW	6
2.4	Functioneel ontwerp aanpassingen WAQUA	9
2.5	Functioneel ontwerp aspecten backbone	11
3	Technisch ontwerp	13
3.1	Inleiding	13
3.2	Technisch ontwerp algemeen	13
3.2.1	Communicatie tussen de twee modules	13
3.2.2	Aanpassingen aan grootheden om consistentie te herstellen	15
3.2.3	Overige algemene aspecten	17
3.3	Technisch ontwerp aanpassingen WAQUA	17
3.3.1	Initialisatiefase	17
3.3.2	Per tijdstap	18
3.3.3	Afbouwfase	19
3.4	Technisch ontwerp aanpassingen Delft3D-FLOW	20
3.4.1	Initialisatiefase	20
3.4.2	Per tijdstap	21
3.4.3	Afbouwfase	22
3.5	Technisch ontwerp aspecten backbone	22

4	Rechte goot	27
4.1	Inleiding.....	27
4.2	Referentiesimulatie Delft3D-FLOW	29
4.3	Gekoppelde simulatie WAQUA - Delft3D-FLOW	30
4.4	Analyse slingeren	33
4.5	Conclusies.....	35
5	Waal model.....	36
5.1	Inleiding.....	36
5.2	Referentiesimulatie Delft3D-FLOW	39
5.3	Gekoppelde simulatie WAQUA/TRIWAQ – Delft3D	41
5.4	Conclusies.....	45
6	Maas model.....	46
6.1	Inleiding.....	46
6.2	Hydrodynamische simulaties.....	47
6.3	Morfologische simulaties.....	49
6.4	Conclusies.....	51
7	Conclusies en aanbevelingen.....	54
7.1	Conclusies.....	54
7.2	Aanbevelingen.....	55

I Inleiding

Dit rapport beschrijft het ontwerp, de realisatie en de resultaten van een prototype-koppeling van WAQUA met de online sedimenttransport- en morfologiemodule van Delft3D-FLOW. Dit project is uitgevoerd in opdracht van Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Kust en Zee/RIKZ. De projectbegeleider vanuit RIKZ was dr. R.J. Vos.

De voorgenoemde koppeling zal in het volgende kortweg worden aangeduid als de WAQUA – Delft3D online morfologie koppeling. Hoewel het project in eerste instantie was opgezet om de koppeling te realiseren tussen WAQUA en de Delft3D online morfologie module is de uiteindelijke implementatie evenzeer van toepassing op een 1-laags TRIWAQ model. Conform de afspraak in de stuurgroep OMS was het achterliggende doel van deze prototype-koppeling het mogelijk maken van een grondige test van de backbone. Daarbij gaat het niet zozeer om het testen van de OMS backbone als IT product, maar om een test van de nagestreefde openheid van het OMS systeem waarbij de backbone voor de data-uitwisseling wordt gebruikt. Daarbij is kennis van de numerieke algoritmes en fysische processen noodzakelijk voor het analyseren van eventuele optredende problemen. De implementatie is getoetst met behulp van een tweetal voor rivier toepassingen relevante testcases voor respectievelijk de Waal en de Maas inclusief overlaten en droogvallen, echter zonder aspecten als parallellisatie, domeindecompositie en geregelde waterbouwkundige constructies (barriers).

Dit project is uitgevoerd door dr.ir. H.R.A. Jagers (projectleiding), dr. M. Genseberger, ir. J.A.Th.M. van Kester en dr. E.D. de Goede samen met dr.ir. E.A.H. Vollebregt namens de onderaannemer VORtech. Het project is onderverdeeld in een viertal fasen, te weten: functioneel ontwerp, technisch ontwerp, implementatie en toetsing, en rapportage. Hoewel het functioneel ontwerp (hoofdstuk 2) en het technisch ontwerp (hoofdstuk 3) eerder als een afzonderlijk rapport zijn verschenen, zijn deze onderdelen in dit eindrapport opgenomen omdat zij een goede beschrijving vormen van de uiteindelijke codeaanpassingen. Voor zover de tekst hiervan niet overeenkwam met de uiteindelijke implementatie is zij aangepast. Vervolgens worden achtereenvolgens de modelresultaten besproken voor een drietal testgevallen: een rechte goot met een lokale verdieping van de bodem (hoofdstuk 4), een Waal model met constante afvoer (hoofdstuk 5) en een Maas model met variabele afvoer (hoofdstuk 6). Tenslotte wordt het rapport afgesloten met conclusies en aanbevelingen (hoofdstuk 7).

2 Functioneel ontwerp

2.1 Inleiding

Dit hoofdstuk omvat het functioneel ontwerp van de koppeling van WAQUA met de online-morfologie module van Delft3D via de OMS backbone. Paragraaf 2.2 beschrijft het complete functioneel ontwerp op hoofdlijnen. De paragrafen 2.3 en 2.4 gaan vervolgens meer in detail in op het functioneel ontwerp van de aanpassingen in respectievelijk Delft3D-FLOW en WAQUA. Tenslotte geeft paragraaf 2.5 een overzicht van de OMS backbone relateerde aspecten.

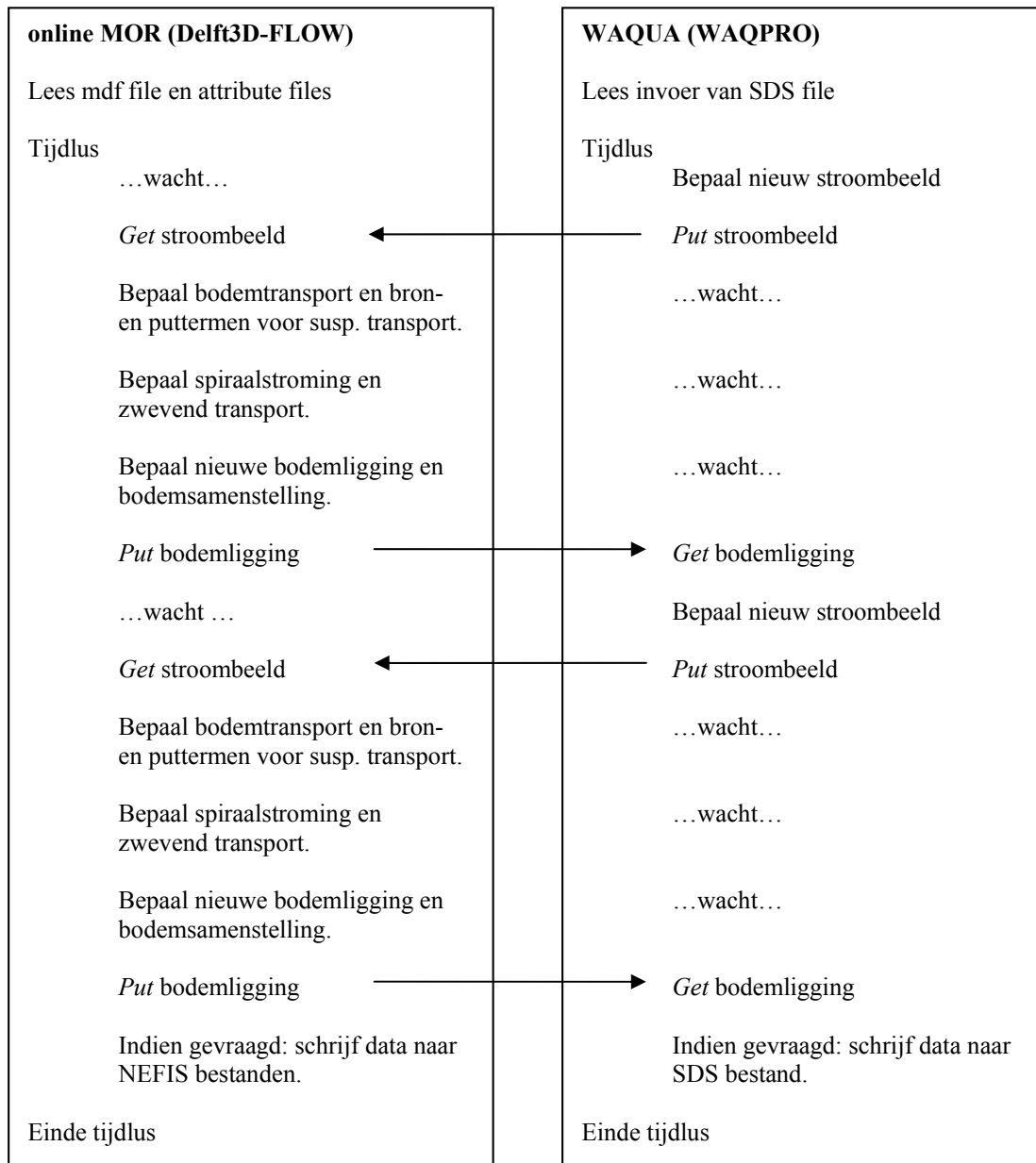
2.2 Functioneel ontwerp op hoofdlijnen

De morfologiekoppeling vereist een tweerichtingskoppeling waarbij twee fysieke modules elkaar op het gehele modeldomein beïnvloeden: het stroombeeld van WAQUA zal door Delft3D-FLOW worden gebruikt voor het bepalen van de sedimenttransporten en een nieuwe bodemligging, welke weer gebruikt zullen worden door WAQUA voor de volgende hydrodynamische tijdstap. Hierbij worden aspecten zoals golven, barriers, parallel rekenen en domein decompositie voorlopig buiten beschouwing gelaten.

Om zo veel mogelijk van de bestaande infrastructuur voor in- en uitvoer te kunnen gebruiken, gaat het functioneel ontwerp uit van een implementatie waarbij WAQUA en Delft3D-FLOW als afzonderlijke programma's worden opgestart. In termen van de OMS backbone betekent dit dat er meerdere rekenprocessen worden gebruikt. Dit kan in de backbone via het gebruik van threads en via MPI. Omdat we uitgaan van bestaande executables is uiteindelijk gekozen voor de MPI optie.

WAQUA en Delft3D-FLOW lezen vervolgens beide hun invoer alsof ze los van elkaar zouden rekenen. Wanneer het Delft3D-FLOW programma echter aankomt bij uitvoeren van de eerste (halve) tijdstap voor de waterbeweging zal zij deze niet zelf uitvoeren, maar de resultaten van WAQUA opvragen via de OMS backbone. Omgekeerd zal WAQUA na het uitvoeren van de eerste halve tijdstap het aangepaste stromingsveld via de OMS backbone aanleveren aan Delft3D-FLOW, waarna deze laatste de morfologische tijdstap uitvoert en de bodem aanpast welke weer via de OMS backbone teruggestuurd wordt naar WAQUA. Hierbij dient opgemerkt te worden dat de gegevens over het sedimenttransport vooralsnog niet naar WAQUA gecommuniceerd zullen worden; deze grootheden zijn alleen van belang voor WAQUA als zij ook op de SDS uitvoer file komen te staan. Omdat die uitbreiding binnen dit project niet is uitgevoerd, heeft de communicatie van de sedimenttransport-grootheden naar WAQUA op dit moment geen zin en is dan ook niet geïmplementeerd. Bij een verdere uitwerking van de modulaire structuur blijft het de vraag of de transporten wel gecommuniceerd moeten worden: bij overgang op het netcdf4/hdf5 bestandsformaat zou men gebruik kunnen maken van de mogelijkheid dat meerdere processen gelijktijdig hetzelfde uitvoerbestand kunnen benaderen.

Na het (op gelijke wijze) uitvoeren van de tweede halve tijdstap schrijven beide programma's afzonderlijk via hun eigen bestaande uitvoer routines de gegevens weg naar de SDS en NEFIS bestanden. Hierbij slaat de Delft3D-FLOW module zowel het ontvangen stroombeeld als de berekende sedimenttransporten en veranderde bodemligging op. De uitvoer van de WAQUA module bevat voorlopig slechts het stroombeeld (bij de gewijzigde bodem) en de initiële (ongewijzigde) bodem. Figuur 1 toont bovenstaande aanpak nog eens schematisch. Hierbij zijn de onderdelen spiraalstroming en zwevend transport meegenomen, maar nog niet volledig getest binnen dit project.



Figuur 1: interactie tussen WAQUA en Delft3D-FLOW per tijdstap ten behoeve van morfologie

In Figuur 1 is de interactie tussen de WAQUA en Delft3D-FLOW programma's schematisch aangegeven, waarbij is aangegeven dat het door WAQUA berekende stroombeeld wordt doorgegeven aan Delft3D-FLOW via de OMS backbone. Welke grootheden wisselen de programma's in dit kader uit?

Om zo veel mogelijk consistentie binnen de afzonderlijke programma's te waarborgen en vanwege efficiëntie in de communicatie betreft dit uitsluitend de primaire grootheden te weten: waterstanden, snelheden en debieten (zie tabel 1) en niet de afgeleide grootheden zoals de waterdiepte in de snelheidspunten en dieptegemiddelde snelheden. Hetzelfde geldt voor de omgekeerde weg waarbij Delft3D-FLOW alleen de bodem in de waterstandspunten communiceert en niet de afgeleide bodemliggingen in de debiet/snelheidspunten. De programma's bepalen vervolgens zelf afzonderlijk van elkaar de afgeleide grootheden benodigd voor de volgende Delft3D-FLOW resp. WAQUA stappen. Omdat de droogval- implementaties van beide systemen vergelijkbaar zijn, is het mogelijk om dezelfde instellingen te gebruiken. Hierdoor treden er geen grote verschillen op voor bodem- en totaaltransportformuleringen. Deze transporten worden immers per tijdstap in alle actieve snelheidspunten bepaald en in dezelfde tijdstap nog in de bodemligging verwerkt; zij kunnen slechts problemen ondervinden van eventuele hoge snelheden die optreden rond droogvallen en onderlopen, maar daarvoor zijn de algoritmes afdoende beveiligd. Wanneer ook zwevend sediment in de berekening wordt meegenomen dan spelen de sedimentconcentraties in droogvallende en overstromende punten ook mee; hierbij kan massabehoud voor de sedimentfracties worden geschonden. In dit project is zwevend sediment niet expliciet getest in de berekeningen, dus kan hierover op dit moment geen eendoordeel gegeven worden (zie de restricties genoemd op pagina 8). Omdat droogvallen en onderlopen in de meeste gevallen gebeurt in ondiepe gebieden met lage sedimentconcentraties (en eventuele fouten dus veelal klein zullen zijn ten opzichte van de onzekerheidsmarge inherent aan morfologische voorspellingen) wordt deze constatering hier voorlopig als aandachtspunt genoemd zonder dit aspect hier in detail uit te werken.

Delft3D-FLOW	WAQUA
u1	up/uh
v1	vp/vh
s1	sep/seh
qxk	qx
qyk	qy

Tabel 1a: primaire waterbewegingsgrootheden in Delft3D-FLOW en WAQUA

Delft3D-FLOW	WAQUA
dps	dps

Tabel 1b: primaire morfologiegrootheden in Delft3D-FLOW en WAQUA

Opmerkingen:

- De extensies "p" en "h" bij de WAQUA grootheden in tabel 1 geven respectievelijk de grootheden op de hele en halve tijdstippen aan. In Delft3D-FLOW hebben de 0-grootheden altijd betrekking op het oude tijdsniveau en de 1-grootheden op het nieuwe. In WAQUA kunnen up en uh betrekking hebben op zowel het oude als het nieuwe tijdsniveau.
- Bij 3D (TRIWAQ) berekeningen zal qzk aan deze lijst moeten worden toegevoegd. Daarnaast moet in het geval van een 3D TRIWAQ koppeling nog aandacht besteed worden aan de afhandeling van de lagen. TRIWAQ heeft de mogelijkheid om de dikte van bepaalde lagen constant te houden en andere lagen op σ -achtige wijze te variëren; Delft3D-FLOW ondersteunt deze combinatie nog niet.

- Volgens Figuur 1 staat WAQUA/TRIWAQ te wachten tussen het aanleveren van het stroombeeld en het opvragen van de bodem. Voor de simulaties uitgevoerd binnen dit project klopt dat wel, maar in het algemeen zal WAQUA/TRIWAQ tijdens die periode haar eigen advection-diffusie routines kunnen aanroepen voor het berekenen van de stoftransporten.

Voorgaande aanpak vereist dat voor beide systemen consistente modelinvoer beschikbaar is. Omdat Baseline de invoerbestanden zoals bodemligging, overlaten, dunne dammen, en ruwheden voor zowel WAQUA als Delft3D-FLOW kan aanleveren (waarbij de verschillen slechts in het wegschrijf format zitten) is dit voor nieuwe rivier toepassingen geen grote beperking¹. De gebruiker moet alleen het hoofdbestand (de Delft3D-FLOW mdf file) met de definitie van de open-randlocaties aanmaken, maar dit is toch nodig om vervolgens de randvoorwaarden voor de morfologie module te kunnen invoeren. Het alternatief — alle gegevens via WAQUA invoer aanleveren — vergt een veel grotere inspanning welke niet bijdraagt aan het achterliggende doel van de koppeling en daarom is dit pad niet bewandeld tijdens dit project.

Opmerkingen:

- **Parallel vs. sequentieel.** Hoewel de programma's parallel aan elkaar draaien is de uitvoering van de activiteiten grotendeels sequentieel: hetzij WAQUA berekent de nieuwe waterbeweging, hetzij Delft3D-FLOW berekent de sediment transporten en de nieuwe bodemligging. Alleen de initialisatie en het schrijven van de (gescheiden) uitvoer zal parallel gebeuren.
- **Droogval instellingen.** Omdat de online morfologie code uitgaat van een discretisatie met de bodem in de waterstandspunten, is bij de implementatie van de koppeling aangesloten bij de WAQUA versie die eind 2004 in het kader van het project "Verbetering droogvallen en onderlopen in WAQUA/TRIWAQ" is opgeleverd. Deze versie was bij aanvang van het project inmiddels geïntegreerd met de moederversie van WAQUA/TRIWAQ in SIMONA; de functionaliteit is beschikbaar vanaf SIMONA introductieversie 2005-02. De keuze tussen DPD_GIVEN of DPS_GIVEN in het SIMONA invoerbestand maakt in principe niet zoveel uit omdat deze optie alleen bij het opstarten effect heeft. De DPS bodemligging in de waterstandspunten (celcentra) dient in het geval van DPD_GIVEN eenmalig uit de DP bodemligging in de hoekpunten afgeleid te worden. Tijdens de simulatie worden de DPS waarden aangepast; in het rekenhart (na communicatie van de DPS waarden van Delft3D-FLOW naar WAQUA) geldt dus in principe DPS_GIVEN. Het droogval algoritme moet hierbij aansluiten door de bodemligging in de snelheidspunten af te leiden uit de DPS waarden en niet uit de DP waarden (omdat die niet geüpdatet worden). Een strengere eis is dat WAQUA en Delft3D-FLOW dezelfde definitie moeten hanteren. Delft3D-FLOW heeft een specifieke droogvaloptie MOR welke gebruikt moet worden in combinatie met morfologische berekeningen; deze optie is geïntroduceerd tijdens het ontwikkeltraject van de online-morfologie module om wijzigingen aan het standaard Delft3D-FLOW gedrag te voorkomen. Uiteindelijk is de MOR implementatie echter gelijk aan de MIN implementatie; daarom moet de MIN_DPS optie in de SIMONA omgeving gehanteerd worden wanneer gekoppeld worden met de online morfologiemodule van Delft3D-FLOW.

¹ Voor het maasdemo testmodel (hoofdstuk 6) is de invoer handmatig geconverteerd.

- **Baseline invoer.** Baseline versie 4.0 kan de bodemligging op de waterstandpunten aanleveren zodat met de tegelaanpak (Delft3D-FLOW optie Dpsopt=DP en WAQUA optie DPS_GIVEN) kan worden gewerkt.
- **Voorziene uitbreidingen.** Op grond van dit globale ontwerp op hoofdlijnen voorzien we nu al de volgende uitbreidingen voor de toekomst.
 - Terugkoppeling spiraalstroming naar waterbeweging in WAQUA (of TRIWAQ 2D).
 - Terugkoppeling van dichtheidseffect van sediment concentraties op WAQUA/TRIWAQ stroombeeld.
 - Advectie-diffusie stap van WAQUA/TRIWAQ voor zout en temperatuur parallel aan Delft3D-FLOW advectie-diffusie stap voor zwevend transport.
 - Communicatie van water temperatuur en saliniteit van WAQUA/TRIWAQ naar Delft3D-FLOW voor effect op valsnelheid en flocculatie.

2.3 Functioneel ontwerp aanpassingen Delft3D-FLOW

Onderstaande tabel geeft een overzicht van de activiteiten die per tijdstap uitgevoerd worden binnen de TRISOL routine van Delft3D-FLOW. Op een tweetal cruciale momenten worden de gegevens uitgewisseld tussen WAQUA en Delft3D-FLOW. Deze nieuwe routines zijn met vette letters aangegeven. De in grijs gemarkeerde activiteiten en routines zijn voor het huidige project niet van belang. De online-visualisatie en uitvoerroutines worden in Delft3D-FLOW aangeroepen op het niveau van TRICOM welke ook de hier beschouwde routine TRISOL aanroept.

Activiteit	Subroutine
Initialize time step	
Optionally update 3D vegetation	UPDDPMVEG
Optionally synchronize in case of fluid mud, RTC	SYNCOM, STRESS, SYNCFLOWRTC
Optionally retrieve wind data	INCMETEO
Boundary conditions; hydrodynamic conditions, Riemann with wave forcing (<i>1st half time step only</i>), constituents (excl. turbulence & secondary flow)	INCBC, INCRBC, INCBCC
Discharges; constituents (excl. turbulence & secondary flow)	INCDIS
Computation of discharge in case of culverts	CULVER
Optionally get heat module input	INCTEM
Optionally get rain and evaporation input	INCEVA, CALEVA
Optionally get process for time-dependent structure parameters	FILTERSTRUCTURES
General transport source/sink terms	SOUSIN
Optionally source/sink terms fluid mud	SOURMU
Eddy viscosity and diffusivity	TURCLO
Optionally internal wave energy model (<i>1st half time step only</i>)	IWE_00
Compute horizontal pressure gradients	DENGRA
Include tide generating forces	TFZETA
Project 3D structures on sigma grid	CDWKAD/HYDKAD / UPDBAR

	If Delft3D-FLOW: Compute FLOW for half time step	ADI
	Elseif WAQUA-morfology coupling: Retrieve FLOW fields from WAQUA and derive secondary quantities	flow_from_backbone
	Optionally compute roller quantities	MASSFL/HDS
	Include wave effects in velocities	EULER
	Optionally compute orbital velocities (associated with roller)	ORBVEL
	Compute water depth at velocity points	UPWHU
	Compute bed form heights (<i>2nd half time step only</i>)	CALKSH
	Calculate roughness due to trachytopes (<i>2nd half time step only</i>)	TRTROU
	Optionally compute new chezy values (including wave effects)	TAUBOT/WRROUF
	Compute HLES eddy viscosity/diffusivity	LPFLUC/PROTKE/DETVIC
	Optionally get source/sink terms spiral flow intensity	SECRHS
	Get constituent discharges (excl. turbulence & secondary flow)	DISCHA
	Compute exchange trough water surface	HEATU
	Thatcher-Harlemann return times; constituent (excl. turbulence & secondary flow)	THAHBC
	Set 3D structures for advection-diffusion equation	TRAKAD
	Compute fall velocities for sediment	FALLVE
	Include wave effects in velocities	EULER
	Compute bedload transport and source/sink terms suspended transport	EROSSED
	Advection diffusion equation for constituents	TRITRA
	Advection diffusion equation for turbulence	TRATUR
	Advection diffusion equation for 2D turbulence	TUR2D
	Forrester filter	FORFIL
	Include wave effects in velocities	EULER
	Optionally track drogues	DROTIM
	Compute transformation coefficients	DERSIG
	Compute densities	DENS
	Optionally compute Eulerian velocities	EULER
	Update bed levels and bed composition	BOTT3D
	If WAQUA-morfology coupling: Communicate new bed levels to WAQUA	dps_to_backbone
	Copy data arrays	F0ISF1
	Compute vertical velocity	WPHY
	Compute vorticity and enstrophy	C_VORT

De hoofdroutine voor het berekenen van sedimenttransport, EROSED, vereist de volgende invoerparameters (per parameter is tussenhaakjes aangegeven waar deze grootte haar waarde vandaan krijgt in het gekoppelde systeem):

- Algemene modelkarakteristieken zoals roosterafmetingen (via Delft3D-FLOW invoer)
- Locaties van (tijdelijk) droge punten en dunne dammen (**afgeleid uit gecommuniceerde primaire stromingsgrootheden** door Delft3D-FLOW)
- Afstanden tussen waterstandspunten (via Delft3D-FLOW invoer)
- Sedimentconcentraties (via Delft3D-FLOW invoer en later van vorige tijdstap)

- Sedimenteigenschappen (via Delft3D-FLOW invoer)
- Waterstanden op oud en nieuw tijdsniveau (**via communicatie**)
- Waterdieptes in de snelheidspunten (**afgeleid uit gecommuniceerde primaire stromingsgrootheden** door Delft3D-FLOW)
- Voor golvenactiviteit gecorrigeerde snelheden in snelheidspunten (routine EULER; gebaseerd op de stroomsnelheden verkregen **via communicatie**)
- Sigma-lagenverdeling (alleen in 3D, via Delft3D-FLOW invoer)
- Bodemligging in waterstandspunten (via Delft3D-FLOW invoer of **initiële communicatie** en vervolgens van vorige tijdstap)
- Z0 bodemruwheid in U en V richting (routine TAUBOT op basis van waterstand en snelheid **via communicatie**)
- Golfkarakteristieken (Tp, Hrms, Theta, Lambda, Uorb) (niet actief)
- Diffusiecoëfficiënten (via TURCLO op basis van Delft3D-FLOW invoer, snelheden en waterdieptes in waterstandspunten)
- Karakteristieken bodemvormen (duinen en ribbels) (via CALKSH op basis van snelheden en waterdieptes in snelheidspunten)

En geeft als uitvoer:

- Bodemtransporten in U en V richting per sediment fractie
- Brontermen voor zwevend transport per sediment fractie

De hoofdroutine voor het berekenen van de nieuwe bodemligging, BOTT3D, heeft vooral de uitvoer van de sedimenttransport routine nodig plus het resultaat van de advection-diffusievergelijking voor het zwevend transport. Daarnaast vereist deze routine:

- Dieptegemiddelde snelheden UMEAN/VMEAN voor de detectie en afhandeling van instroomranden. Deze worden uitgerekend op basis van dieptemiddeling van de ontvangen snelheden; in het geval van WAQUA (een dieptegemiddeld model) komen die exact overeen met de gecommuniceerde snelheden.

Restricties:

- **Totaal- of bodemtransport.** We hebben ons binnen dit project conform de doelstelling van het project beperkt tot alleen 2D zand/grind transport met uniform sediment. Slib modellering en 3D sediment transport vallen buiten het project.
 - De gebruikte formuleringen (Engelund-Hansen, Meyer-Peter & Müller) voor sedimenttransport zijn hetzij total-load formuleringen (en omvatten dus zowel het bed-load als suspended-load) of formuleringen voor omstandigheden waarbij zwevend transport geen significante bijdrage levert. Het eerst geval is van toepassing op bijvoorbeeld de Waal, het tweede geval de Grensmaas. Aparte modellering van het zwevend sediment via de advection-diffusie vergelijking is voor de Nederlandse rivieren niet nodig omdat de zwevend sediment concentraties zich daar vrijwel instantaan aanpassen aan de lokale omstandigheden. Je kunt uitgaan van het lokale evenwichtsprofiel voor de zwevend sediment concentraties en voor alle riviermorfologische studies in Nederland heeft men tot nu toe succesvol gebruik gemaakt van de total-load formuleringen.

- Met wash-load wordt bedoeld het sediment dat in suspensie is (bij de bovenrand) en blijft in het hele modelgebied (tot aan de benedenrand); dit sediment heeft geen invloed op de morfologische ontwikkeling in het modelgebied (tenzij het dichtheidseffect van belang is zoals in de Gele Rivier) en wordt dus altijd buiten beschouwing gelaten bij de riviermorfologische modellering (alleen in de vergelijking met meetdata is deze component van belang).
- **Enkel domein.** In dit project zijn de Delft3D-FLOW opties voor domein decompositie (evt. in combinatie met parallel rekenen) niet toegepast.

2.4 Functioneel ontwerp aanpassingen WAQUA

Onderstaande tabel geeft een overzicht van de activiteiten die per tijdstap uitgevoerd worden binnen de WASSIM routine van WAQUA/TRIWAQ. Op een tweetal cruciale momenten worden gegevens uitgewisseld tussen Delft3D-FLOW en WAQUA. Deze nieuwe routines zijn met vette letters aangegeven. De in grijs gemarkeerde activiteiten en routines zijn voor het huidige project niet van belang.

Activiteit	Subroutine
Get/initialize time parameters controlling the integration loop	
Print current run status with respect to FLOW	WASPSC
Handle settings for integration, handle first/next Eulerian Time Integrals	WASFEI
Set FLOW forcings for half time step NST	WASSFF
If necessary, set TRANSPORT forcings for half time step NST	WASSTF
Save and correct FLOW/TRANSPORT forcings with Kalman filter	WASKTH
Compute FLOW for half time step NST	WASSPU, WASSPV
If WAQUA-morphology coupling: Communicate FLOW quantities to Delft3D-FLOW	flow_to_backbone
Add momentary contribution to current FLOW Time Integrals Eulerian and Lagrangian	WASFEI, WASFLI
Optionally compute new K-Nikuradse-at-U/V	WASKNU, WASKNV
Compute new CHEZY-at-U/V	WASCVU, WASCVV
Compute new cumulative history data for FLOW	WASCHF
If TRANSPORT then	
Prepare for and call the user routine, influencing the 1st half step of transport computation	
Compute TRANSPORT for half time step NST	WASTRU, WASTRV
If necessary and KMAX > 1, compute TURBULENCE for half time step NST	WASXRU, WASXRV
Compute new cumulative history data for TRANSPORT	WASCHT
If WAQUA-morphology coupling: Retrieve bed levels from Delft3D-FLOW and derive secondary quantities (a.o. drying flooding check)	dps_from_backbone
Optionally build right-hand side of system for harmonic analysis of tides	WASBTI
Optionally Kalman filter FLOW	WASKAL

OUTPUT to SDS FILE	WASMAF, WASHIF, WASWTI, WASRSF, WASMAT, WASHIT, WASRST
Write first (fake) FLOW Time Integrals	WASWTI
Compute mean and standard deviations of residuals when observed data is available	WASOBS
Write data to BULK PRINT FILE	WASPBF

Restricties:

- **WAQUA vs TRIWAQ.** De implementatie werkt voor zowel de WAQUA als de TRIWAQ tak in de WAQPRO code, maar in het geval van TRIWAQ is de implementatie beperkt tot modellen met slechts één laag.
- **Enkel domein.** In dit project zijn de WAQUA/TRIWAQ opties voor parallel rekenen en domein decompositie niet gebruikt; de koppeling werkt niet voor die situaties.
- **Geen extra iteratielus.** Bij de implementatie van de koppeling zijn we uitgegaan van de huidige online morfologie functionaliteit in Delft3D. Dit houdt onder andere in dat de tijdstappen van WAQUA maar eenmalig uitgevoerd hoeven te worden. Een heel intense koppeling tussen de hydrodynamica en morfologie waarin de hydrodynamica voor een aantal tijdstappen steeds opnieuw wordt uitgerekend met de aangepaste bodem wordt dus nog niet ondersteund. Dit iteratie proces is binnen Delft3D ook nog niet aanwezig en het ontbreken daarvan heeft nog niet tot problemen geleid. Hier worden dan ook geen problemen verwacht (mogelijke probleemgebieden zijn: morfologische ontwikkeling van superkritisch stromende rivieren, gebieden met zeer grote dichtheidseffecten, vrij eroderende oevers).
- **Aanpassing secundaire grootheden.** Wanneer een nieuwe bodemligging wordt ontvangen van Delft3D-FLOW dan moeten er aanpassingen aan de toestandsarrays van WAQUA worden gemaakt. Bijvoorbeeld moeten de dieptes in snelheidspunten worden herberekend wanneer er nieuwe dieptes in waterstandspunten zijn neergezet. Verder kan het nodig zijn dat er extra schotjes worden geplaatst. De benodigde aanpassingen aan de toestandsarrays zijn alleen worden uitgewerkt voor de situatie dat de bodemligging in waterstandspunten is opgegeven (optie DPS_GIVEN); dit sluit aan bij de implementatie van de online morfologie module.
- **Overlaten en morfologische verandering.** Een aandachtspunt is de modellering van overlaten en barriërs in combinatie met morfologie. Omdat de bodem in een morfologische berekening zal veranderen kunnen overlaten en barriërs tijdelijk onder het zand komen te liggen. De routines moeten robuust genoeg zijn om dit aan te kunnen. In de praktijk komt dit eigenlijk zelden voor omdat de meeste overlaten in de uiterwaarden liggen waar in het algemeen geen morfologische verandering optreedt. Binnen het project zijn op dit punt geen problemen geconstateerd met de huidige implementatie. De drempelhoogtes voor en achter overlaten worden nog niet aangepast.
- **Modellering overlaten.** Twee andere aspecten ten aanzien van overlaten en barriërs zijn: (1) Delft3D-FLOW kent geen diagonale overlaten terwijl deze veelvuldig in de WAQUA schematisaties voorkomen, en (2) het energieverlies veroorzaakt door overlaten wordt in WAQUA verwerkt in de Chézy term terwijl dit bij Delft3D-FLOW als een aparte verliesterm in het rekenhart wordt meegenomen. Beide aspecten hebben geen effect op de koppeling om de volgende redenen:

- De blokkering van de stroming bij lage waterstanden vindt op gelijke wijze plaats in beide modellen, alleen de afhandeling bij overstroming is iets anders. Omdat WAQUA het stroombeeld uitrekent zullen de diagonale overlaten als zodanig worden meegenomen in de waterbeweging. De daaruit volgende snelheden en debieten worden door Delft3D-FLOW overgenomen voor de morfologische stap. In de morfologische stap is de exacte ligging van de overlaten niet van belang omdat de morfologiemodule de overlaten helemaal niet ziet: bodemtransport wordt niet geblokkeerd. Proeven van enkele jaren geleden bij de TUD hebben uitgewezen dat deze aanpak helemaal zo gek nog niet is voor de Nederlandse situaties; sediment dat normaal als bodemtransport wordt verplaatst wordt over een overlaat heen getild door de lokaal verhoogde turbulentie en verticale versnellingen. De berekening van de waterweging met diagonale overlaten door WAQUA zal daarom zonder problemen samengaan met de morfologische ontwikkeling in de morfologiemodule zonder (diagonale) overlaten. Ter zijde: ervaring leert dat het verschil in het stroombeeld tussen Delft3D en WAQUA ten gevolge van de andere schematisatie van diagonale overlaten slechts in beperkte mate effect heeft op de waterstanden.
- Het verwerken van de overlaten in de bodemruwheid zou wel een groot probleem kunnen vormen. Omdat we echter de ruwheid gebruiken welke wordt uitgerekend door Delft3D-FLOW (op basis van gecommuniceerde primaire grootheden) is dit ook geen probleem. De “vervuilde” Chezy term blijft aan de WAQUA kant en beïnvloed de morfologie niet.

2.5 Functioneel ontwerp aspecten backbone

In eerste instantie was het moeilijk om de twee bestaande programma's onder de backbone te brengen en tegelijk te laten opstarten. Hiervoor moest WAQUA/TRIWAQ kunnen worden gecompileerd met de OMS backbone en met gebruik van MPI (“*message passing interface*”). Met uitzondering van een aantal Delft3D referentiesimulaties zijn alle werkzaamheden uitgevoerd onder Linux omdat alleen op dat platform alle software-componenten beschikbaar waren. Binnen het project hebben we de Intel compiler gebruikt omdat die ook voor Delft3D-FLOW gebruikt wordt (dus niet de Lahey compiler). Dit is in overeenstemming met eerdere ervaringen uit het OMS project waarbij ook de voorkeur voor de Intel-compiler naar voren kwam. Met betrekking tot MPI hebben we gebruik gemaakt van de LAM-MPI implementatie.

De communicatiebibliotheek voor parallel rekenen met WAQUA/TRIWAQ, COCLIB, maakt echter gebruik van een ander communicatie/synchronisatie mechanisme, namelijk PVM (“*parallel virtual machine*”). Om te voorkomen dat zowel MPI als PVM moet worden meegelinkt, werd tijdens de functioneel ontwerp fase in eerste instantie het plan opgevat om de communicatiebibliotheek COCLIB te vervangen door de dummy-implementatie COCDUM. Omdat dit problemen gaf bij het compileren van de preprocessor WAQPRE is uiteindelijk tijdens de technisch ontwerp fase de keuze gemaakt om toch zowel MPI als PVM mee te linken; aangezien de PVM functionaliteit (t.b.v. parallel rekenen) tijdens dit project niet gebruikt wordt, heeft deze aanpak tijdens dit project geen problemen opgeleverd.

Met betrekking tot het communiceren van data tussen WAQUA en Delft3D-FLOW online morfologie is van belang dat de OMS backbone momenteel alleen het communiceren van

“Aggregaten” ondersteunt (geen voorzieningen voor losse arrays). Dit is in het algemeen geen grote beperking omdat de arrays die moeten worden gecommuniceerd eenvoudig in een aggregaat kunnen worden gezet. Omdat we de gecommuniceerde data zoveel mogelijk zelfbeschrijvend wilden houden, zijn de gecommuniceerde aggregaten opgezet met een meer generieke insteek (zie paragraaf 3.2 van het technisch ontwerp voor details). In de generieke structuur wordt het type rooster opgeslagen met daarnaast afhankelijk van het type alle beschrijvende variabelen die nodig zijn. Daarbij moeten is ervoor gekozen om de communicatie te laten verlopen op het bij beide programma’s en gebruiker bekende deel van het rekendomein, d.w.z. de uitgewisselde arrays hebben de grootte² n_{max} bij m_{max} terwijl de indicering/afmeting van de matrices van de beide rekenmodellen gelijk is aan $(1:n_{max}, -2:m_{max}+3)$ in het geval van WAQUA/TRIWAQ en $(1:n_{max}, -1:m_{max}+2)$ in het geval van Delft3D-FLOW afgezien van eventuele domeindecompositie-randjes.

² In Delft3D-FLOW wordt ervoor gezorgd dat n_{max} altijd oneven is; daarom geldt in Delft3D-FLOW dat de afmeting gelijk is aan n_{max} x m_{max}

3 Technisch ontwerp

3.1 Inleiding

Dit hoofdstuk betreft fase 2 van het project: de uitwerking van het functioneel ontwerp tot een technisch ontwerp. Dit technisch ontwerp dient gelezen te worden als aanvulling op het functioneel ontwerp in hoofdstuk 2.

Paragraaf 3.2 beschrijft de algemene aspecten van het technisch ontwerp, zoals de datastructuren. De paragrafen 3.3 en 3.4 gaan vervolgens meer in detail in op het technisch ontwerp van de aanpassingen in respectievelijk WAQUA en Delft3D-FLOW. Tenslotte geeft paragraaf 3.5 een overzicht van de OMS backbone en MPI gerelateerde aspecten.

In dit technisch ontwerp komen onder andere de volgende zaken aan de orde:

- beschrijving datastructuren
- beschrijving communicatie van relevante grootheden
- afhandelen van overlaten
- wijze van afstemmen van de schotjes
- complicaties van Delft3D-FLOW (FLEXlm) met MPI oplossen
- aanpak probleem van verschillen in precisie (Delft3D-FLOW kan zowel in dubbele als enkele precisie draaien en WAQUA draait nu altijd in enkele precisie)

3.2 Technisch ontwerp algemeen

3.2.1 Communicatie tussen de twee modules

In het functioneel ontwerp hebben we twee communicatiemomenten gedefinieerd te weten:

1. communicatie van primaire stromingsgrootheden (snelheden, waterstand, en debieten zoals vermeld in tabel 1 in hoofdstuk 2) van WAQUA naar online morfologie (Delft3D-FLOW) via de OMS backbone
2. communicatie van de bodemligging (in waterstandspunten) van online morfologie (Delft3D-FLOW) naar WAQUA via de OMS backbone

Communicatie via de OMS backbone is gebaseerd op datastructuren die uit aggregaten zijn opgebouwd. Intern in Delft3D-FLOW en WAQUA zijn deze niet direct beschikbaar, maar worden eerst eigen interne datastructuren opgebouwd. In Delft3D-FLOW is een extra aspect dat er wordt gestreefd naar een generieke datadefinitie, onder andere ten behoeve van de ontwikkeling van een nieuwe online-visualisatiemodule. Hiervoor worden mogelijk nieuwe structures (F90 derived types) geïntroduceerd in Delft3D-FLOW waarin meta-informatie over de daadwerkelijke data kan worden opgeslagen.

Men kan ervoor kiezen om alleen de strikt noodzakelijke gegevens in de aggregaten te stoppen, namelijk de uit te wisselen getallen zelf. Dit is op korte termijn de eenvoudigste aanpak, maar is op termijn onvoldoende voor generieke koppelingen. Daarom streven wij ernaar om de aggregaten zo veel mogelijk zelfbeschrijvend te maken; daartoe sluiten we aan bij de datadefinitie die in Delft3D wordt beoogd voor o.a. online-visualisatie, waarbij ook gekeken is naar internationale standaarden zoals OpenMI en XMDF. Op termijn zou een standaard datamodel voor OMS moeten worden gedefinieerd, waarbij ook de huidige datastructuur van SIMONA nog eens expliciet in beschouwing moet worden genomen.

In de huidige toepassing worden er alleen 2D en 3D velden gecommuniceerd. De aggregaten die we hierbij gebruiken zijn:

```
DataSet - Name = 'm_velocity'
- Description = 'velocity in first grid direction'
- Unit = 'm/s'
- Topology = 'my_grid_topology'
- LocationID = 'IFaces3D'
- StorageKind = 'float64'
- DefaultValue = -999.0
- MissingValue = -999.0
- StorageMethod = 'full array'
- StorageOrder = [ 2, 1, 3 ]
- Values = [lineaire array met NMAX*MMAX*KMAX waarden, dubbele precisie]
- Time = 1723131.533435 (dubbele precisie Juliaanse datum met fractioneel tijdstip)
```

Deze aggregaat is niet volledig zelfbeschrijvend want zij verwijst naar een topologie genaamd 'my_grid_topology' en een locatie beschrijving 'IFaces3D' op die topologie (verwijzend naar de zijvlakjes van elke rekenlaag in elke waterkolom in de eerste rooster-richting). Uiteindelijk zal een van de programma's het rooster gaan inlezen en toeleveren aan de andere modules. In dat geval zal er een ander aggregaat gecommuniceerd worden waarin de topologie gedefinieerd wordt (met daaraan impliciet gekoppeld de locatie beschrijvingen). Voorlopig gaan we uit van de volgende topologie definitie:

```
Mesh - Name = 'my_grid_topology'
- Type = 'structured'
- Dimensions = [ MMAX, NMAX, KMAX ]
- IndexLowerbound = [ 1, 1, 1 ]
- XCoordinates = 'my_grid_xcoordinates'
- YCoordinates = 'my_grid_ycoordinates'
- ZCoordinates = 'my_grid_zcoordinates'
```

welke wederom verwijst naar een drietal DataSets met de coördinaten (de Topology velden van deze DataSets verwijzen terug naar deze rooster topologie).

- In deze definitie is ervoor gekozen om arrays zonder extra randjes te communiceren (in WAQUA/TRIWAQ loopt m van -2 tot MMAX+3; in Delft3D-FLOW loopt m van -1 tot MMAX+2 en n van 1 tot NMAX waarbij NMAX één groter kan zijn dan NMAXUS welke overeenkomt met de NMAX waarde in WAQUA/TRIWAQ). Ook randjes t.b.v. domein-decompositie (in M- en N-richting) vallen hierbuiten.
- Alle grootheden worden in dubbele precisie gecommuniceerd. Dit is de meest eenvoudige afspraak die tussen de modules kan worden gemaakt. Verder is deze keuze gedaan met het oog op toekomstige ontwikkelingen. Delft3D-FLOW en WAQUA dienen zelf voor de conversie van en naar single precisie te zorgen.

Uit deze zienswijze volgt dat het niet logisch is om de debieten q_x en q_y in horizontale richtingen aan te passen nadat de bodem is aangepast³. Ook de waterstand moet niet worden aangepast. Om de massabalans sluitend te maken (bijvoorbeeld voor waterkwaliteitsberekeningen) moet worden uitgerekend hoeveel volume er met de bodem wordt uitgewisseld. Nadat de bodem is aangepast moet de waterdiepte worden herberekend, en in TRIWAQ moeten de posities van laaginterfaces worden aangepast.

Over de aanpassing van stroomsnelheden kan worden gediscussieerd. De snelheid kan worden aangepast door het debiet door de waterdiepte te delen. Dit geeft bij erosie een verlaging van de snelheid die elegant kan worden uitgelegd: het volume dat erbij komt uit de bodem had geen horizontale snelheid, en dit wordt bij deze aanpak in de snelheid verdisconteerd (dit zou formeel gezien in de impulsvergelijking opgenomen moeten worden). Deze redenering gaat niet goed op bij sedimentatie, waar de snelheid door herberekening wordt verhoogd. Bovendien is het verhogen van de snelheid ongewenst omdat er vooral in ondiepe gebieden relatief grote aanpassingen aan de waterdiepte kunnen worden gemaakt (van tijd tot tijd meer dan 5%) welke via deze weg tot lokale pieken in de snelheid kunnen leiden. Daarom kiezen we ervoor om de snelheden niet aan te passen.

De nieuwe zienswijze helpt ook bij het bepalen van de benodigde aanpassingen aan concentraties van opgeloste stoffen. In eerste instantie was het idee dat de concentraties moesten worden geschaald, omdat een bepaalde massa opgeloste stof zich over een ander volume ging verdelen. De aanpassing is echter niet persé gewenst voor de ‘stoffen’ zout en temperatuur. Of de concentratie verandert hangt af van de concentratie die aan de uitwisselingsflux met de bodem wordt toegedicht. Dit zou je dus per getransporteerde stof moeten beschrijven. In TRIWAQ en Delft3D-FLOW zou je verder bij gebruik van meerdere lagen rekening moeten houden met de verandering van de posities van de laaginterfaces. Dit impliceert een verticaal debiet tussen de lagen waarmee ook de getransporteerde stoffen worden herverdeeld. In het huidige project worden beide effecten vooralsnog genegeerd. Aan TRIWAQ wordt geen aandacht besteed, en in WAQUA wordt verondersteld dat de uitwisseling met de bodem dezelfde concentratie heeft als de concentratie in het inwendige van het gebied.

Conclusie: Conform de huidige werkwijze in Delft3D-FLOW zullen dus noch de concentraties noch de waterstanden worden aangepast. De enige aanpassing van de waterstanden die Delft3D-FLOW uitvoert betreft een aanpassing van de waterstanden op droge punten in het geval van “oevererosie” waarbij de waterstand mee moet zakken met de lokale bodemligging totdat het punt nat wordt. Deze correctie zal ook in WAQUA uitgevoerd moeten worden voor consistentie omdat dergelijke vormen van erosie in het Nederlands rivierengebied niet voorkomen is deze correctiestap nog niet geïmplementeerd. Feitelijk zou in dat geval de waterstand in het naburige natte punt verhoogd moeten worden vanwege de zijdelingse flux van sediment (en eventueel grondwater); voorlopig wordt deze correctie in overeenstemming met de aanpak in Delft3D-FLOW achterwege gelaten.

³ Hierop valt nog aan te merken dat de hydrodynamica stap niet de uitwisseling van opgeloste stoffen berekent; deze aanpassingen vinden pas plaats tijdens de advectie-diffusie stap van de opgeloste stoffen (grijze pijlen in Figuur 2). Strikt gesproken zou je dus nog vraagtekens kunnen zetten bij de interpretatie van q_x en q_y als volumeflux.

3.2.3 Overige algemene aspecten

- Het project is uitgevoerd op basis van SIMONA versie Intro2005-02 en de OMS backbone versie met de versienummers 1.7.7 (oms_backbone), 1.7.3 (oms) en 1.1.1 (f90template). In de functie oms_obj_print (in de module m_oms_base_data) is de regel ‘call flush(1)’ uitgecommentarieerd. Van Delft3D-FLOW wordt de versie 3.50.06.00 d.d. 25 augustus 2005 gebruikt.
- De invoer wordt voor beide modellen afzonderlijk gegenereerd door Baseline (of handmatig). Hierdoor is het niet duidelijk welke van de twee programma’s de leiding heeft. Om aan te geven dat de waterbewegingsmodule — in dit geval dus WAQUA — de leiding heeft, zal WAQUA het aantal tijdstappen bepalen en stuurt dit aan het begin van de simulatie toe aan Delft3D-FLOW.
- Delft3D-FLOW en WAQUA dienen hetzelfde droogvalcontrole algoritme te gebruiken, namelijk de zogenoemde “de tegelaanpak”. Meer in detail geformuleerd: zowel Delft3D-FLOW als WAQUA gaan uit van de bodem in de waterstandspunten. Voor het bepalen van de bodemligging en waterdiepte in de snelheidspunten wordt in Delft3D-FLOW de optie Dpuopt = MOR gebruikt voor morfologische simulaties (hetgeen, zoals in het functioneel ontwerp vermeld, overeenkomt met Dpuopt = MIN); de overeenkomstige optie in WAQUA/TRIWAQ is METH_DPUV = DPS_MIN. Hiermee wordt ervoor gezorgd dat de schotjes in Delft3D-FLOW en WAQUA op gelijke wijze worden gezet.

3.3 Technisch ontwerp aanpassingen WAQUA

De aanpassingen aan WAQUA tijdens de initialisatiefase betreffen het opstarten van de backbone, het definiëren van de te communiceren aggregaten, en de communicatie van het aantal uit te voeren tijdstappen; tijdens de berekening worden de primaire grootheden gecommuniceerd en worden de secundaire grootheden aangepast; tijdens de afsluitende fase worden alle aggregaten en backbone gerelateerde data opgeruimd.

3.3.1 Initialisatiefase

Tijdens de initialisatiefase worden de volgende stappen onderscheiden: 1) opstarten Backbone, 2) aanmaken datastructuren en aggregaten, en 3) het communiceren van het aantal tijdstappen.

opstarten Backbone

Hiertoe worden de oms_start en oms_activate routines aangeroepen. Dit gebeurt zowel vanuit WAQUA als vanuit Delft3D-FLOW.

datastructuur aanmaken mbv. Backbone, meta-informatie definiëren

WAQUA communiceert de stromingstoestand naar Delft3D-FLOW en definieert daarvoor initieel een aantal aggregates: agg_u, agg_v, agg_s, agg_qx en agg_qy. Deze hebben allemaal de in paragraaf 3.2.1 gedefinieerde structuur voor een “DataSet”.

```

use Oms
type(t_oms_aggregate) :: agg_u
real(kind=OMS_DP), dimension(:), pointer :: rtmp

NoError = oms_agg_create(agg_u, 'm_velocity')
NoError = oms_agg_add_item(agg_u, 'Description', 'velocity in first grid direction')
NoError = ...
allocate(rtmp(nmax*mmax*kmax))
j = 0
do k = 1, kmax ! kmax == 1 in WAQUA
  do m = 1, mmax
    do n = 1, nmax
      i = i + 1
      rtmp(i) = real(up(n,m,k),OMS_DP)
    enddo
  enddo
enddo
NoError = oms_agg_add_item(agg_u, 'Values', rtmp)

```

Opmerkingen:

- De aggregaten die voor het communiceren van stromingsgrootheden worden gebruikt worden in de initialisatiefase aangemaakt en voor de eerste keer gevuld. Dezelfde aggregaten worden in de rekenlus gebruikt om nieuwe waarden in op te slaan en te communiceren met Delft3D-FLOW.
- OMS-functie `oms_agg_add_item` neemt de controle over van het array dat in het aggregaat wordt gestopt (laatste argument) Het is hierbij net alsof de routine als laatste 'nullify(rtmp)' uitvoert. Het array `rtmp` mag daarom door de aanroepende routine niet gedealloceerd worden; het moet juist iedere keer opnieuw worden gealloceerd: telkens wordt weer een nieuwe array aan OMS overgedragen.
- Bij het vullen van array `rtmp` worden de afgesproken dimensies en precisie gehanteerd. Hierbij wordt een selectie gemaakt uit het array `up` dat in WAQUA/TRIWAQ de volgende declaratie heeft: 'real up(nmax, -2:mmax+3, kmax)' waarbij `kmax` gelijk is aan 1 in WAQUA.

Communicatie van het aantal uit te voeren tijdstappen van WAQUA naar Delft3D-FLOW.

Voor de communicatie van het aantal tijdstappen wordt een heel simpel aggregaat 'agg_tim' aangemaakt met als enige item 'Nsteps'. Dit aggregaat wordt naar Delft3D-FLOW gecommuniceerd via de call `oms_dsp_put('nsteps', agg_tim)`. Hierin is 'nsteps' het label dat aan de communicatie wordt toegekend. Dit label komt terug in de configuratiefile voor de koppeling, zie paragraaf 3.5.

3.3.2 Per tijdstap

De aanpassing van bodemligging wordt elke halve tijdstap uitgevoerd in verband met de bron- en puttermen voor het zwevend sediment transport die voor beide halve tijdstappen gegeven/bepaald moeten worden. De terugkoppeling op de waterbeweging vindt daardoor ook elke halve tijdstap plaats. Per tijdstap worden de volgende acties uitgevoerd:

In subroutine `wassim` wordt na iedere halve tijdstap voor de waterbeweging de stromingstoestand verstuurd.

```

call wasspu...
call flow_to_backbone(primaire stromingsgrootheden 1e halve tijdstap)
....
call wasspv...
call flow_to_backbone(primaire stromingsgrootheden 2e halve tijdstap)

```

Direct na de berekening van transport en turbulentie in de 1^e en 2^e halve tijdstap wordt gewacht op de nieuwe bodemligging van online morfologie:

```

if oms_coupled
  call dps_from_backbone(bodemligging in waterstandspunten)
  call dps_consistency_updates(primaire/secundaire stromingsgrootheden, bodemligging)
endif

```

Hierbij zijn de daarvoor benodigde subroutines in quasi-code gedefinieerd als:

```

subroutine flow_to_backbone(primaire grootheden)

Verkrijg/activeer aggregaat agg_u
Vraag referentie/pointer op naar item 'Values' van agg_u (oms_agg_get_reference)
Kopieer waarden van u-array naar (double precision) 'Values'-array
Pas item 'Time' aan
Stuur aggregaat weg via oms_dsp_put met label/datasetnaam 'm_velocity'
...analoog voor n_velocity, waterlevels, m_flux, n_flux (flux: debieten tussen roostercellen)

```

```

subroutine dps_from_backbone(bodemligging in waterstandspunten)

Vraag aggregaat op via oms_dsp_get met label/datasetnaam 'dps'
Vraag referentie op naar item 'Values' van agg_dps
Kopieer waarden van (double precision) 'Values'-array naar (single precision) dps-array
Geef aggregaat vrij door middel van oms_agg_destroy

```

```

subroutine dps_consistency_updates(primaire/secundaire grootheden, bodemligging)

Herbereken arrays dpu en dpv met de gebruikte interpolatiemethode meth_dpuv=DPS_MIN
Herbereken de totale doorstroomhoogtes hu en hv
In TRIWAQ: kopieer de bodemcijfers naar zksp/h, zkup/h, zkvp/h
In TRIWAQ: herbereken de posities van laaginterfaces, zksp/h, zkup/h en zkvp/h
Voer droogvalcontroles uit in u- en in v-punten, update kfup/h, kfvp/h

```

Opmerkingen:

- Na het ontvangen van een aggregaat van de backbone dient de ontvanger het geheugen weer vrij te geven d.m.v. oms_agg_destroy om memory leaks te voorkomen.
- Overlaten zouden onder de bodem kunnen komen bij morfologische veranderingen. Voorzover het zich nu laat aanzien kan de WAQUA code hier tegen.

3.3.3 Afbouwfase

Tijdens de afbouwfase worden twee stappen onderscheiden, namelijk het opruimen van de aggregaten voor zover nodig en het beëindigen van de Backbone. Het afbreken van de aggregaten gaat met behulp van oms_agg_destroy. De verbinding met de Backbone wordt afgesloten met oms_deactivate en oms_stop.

3.4 Technisch ontwerp aanpassingen Delft3D-FLOW

De aanpassingen die aan Delft3D-FLOW zullen worden gemaakt zijn vergelijkbaar met die van WAQUA, alleen dan omgekeerd ten aanzien van de communicatie van het stroombeeld, de parameters en de bodemligging. Verder zijn de aanpassingen die aan lokale arrays moeten worden gemaakt na het ontvangen van data anders.

3.4.1 Initialisatiefase

Tijdens de initialisatiefase worden de volgende stappen onderscheiden: 1) opstarten Backbone, 2) aanmaken datastructuren en aggregaten, en 3) het communiceren van het aantal tijdstappen.

opstarten Backbone

Hier toe worden oms_start en oms_activate routines aangeroepen. Dit gebeurt zowel vanuit Delft3D-FLOW als vanuit WAQUA.

datastructuur aanmaken mbv. Backbone, meta-informatie definiëren

Delft3D-FLOW moet de bodemgegevens communiceren naar WAQUA en definieert daarvoor initieel een aggregate agg_dps conform de in paragraaf 3.2.1 gedefinieerde structuur voor een "DataSet". Uitgaande van een Fortran datastructuur met alle benodigde gegevens maar met de volledige interne lineaire Delft3D-FLOW array dps(nmlb:nmub) voor de diepte in de waterstandspunten zal de conversie naar de backbone op de volgende wijze geschieden:

```

use Oms
type(t_oms_aggregate) :: agg_dps
type(dataset) :: dps
real(kind=OMS_DP), dimension(:), pointer :: rtmp

ddb = gdp%d%ddbbound
nmaxddb = nmax+2*ddb
NoError = oms_agg_create(agg_dps, dps%Name)
NoError = oms_agg_add_item(agg_dps, 'Description', dps%Description)
NoError = ...
allocate(rtmp(nmax*mmax))
i = 0
do m = 1, mmax
  nm = (m+ddb-1)*nmaxddb + ddb
  do n = 1, nmaxus
    i = i + 1
    nm = nm + 1
    rtmp(i) = real(dps%Value(nm),OMS_DP)
  enddo
enddo
NoError = oms_agg_add_item(agg_dps, 'Values', rtmp)

```

Opmerking:

- Het is belangrijk om te constateren dat de grootheid n_{max} in WAQUA overeenkomt met n_{maxus} in Delft3D-FLOW. De dimensie n_{max} in Delft3D-FLOW is altijd oneven en kan daarom gelijk zijn aan n_{maxus} of één groter.

Communicatie van het aantal uit te voeren tijdstappen van WAQUA naar Delft3D-FLOW.

Voor de communicatie van het aantal tijdstippen wordt het aggregaat 'agg_tim' opgevraagd via de call `oms_dsp_get('nsteps', agg_tim)`. Waarna vervolgens met `oms_agg_get_value` het aantal tijdstappen wordt opgevraagd. Omdat Delft3D-FLOW ook binnen Delft3D-MOR draaide als module kan het tijdsinterval waarover Delft3D-FLOW de simulatie uitvoert verschuiven. Daarom wordt er niet gerekend met een relatief aantal tijdstappen, maar met absolute tijdstapnummers. Na ontvangst van het aantal tijdstappen `nsteps` berekent Delft3D-FLOW hieruit het nummer van de laatste tijdstap `itstop`; dit is `itstart+nsteps`.

Opmerking:

- Als de eindtijd zoals Delft3D-FLOW deze ontvangt van WAQUA op een later tijdstip ligt dan de eindtijd gespecificeerd in het Delft3D-FLOW invoerbestand, kan het gebeuren dat Delft3D-FLOW tijdens de simulatie uit de tijdseries gespecificeerd in de Delft3D-FLOW invoerbestanden loopt. Delft3D-FLOW standalone voert bij het opstarten een controle uit om dit te voorkomen; de nu geïntroduceerde aanpassing van de eindtijd van de simulatie vindt plaats nadat de tijdseries zijn gecontroleerd zodat de controle in het geval van een gekoppelde simulatie geen garantie biedt op een correcte afloop.

3.4.2 Per tijdstap

Vervolgens zullen per tijdstap de volgende acties worden uitgevoerd:

In de hoofdrekenlus van Delft3D-FLOW voor de bepaling van de sedimenttransporten:

```
if FlowSource == OMS_backbone
  call flow_from_backbone(primaire grootheden & secundaire grootheden)
else ! default: FlowSource == internal
  call ADI
endif
```

en na de berekening van de nieuwe bodemligging:

```
if FlowSource == OMS_backbone
  call dps_to_backbone(bodemligging in waterstandspunten)
endif
```

Hierbij zijn de daarvoor benodigde subroutines in quasi-code gedefinieerd als:

```
subroutine flow_from_backbone(primaire grootheden & secundaire grootheden)

call get_primary_quantities(primaire grootheden)
call compute_derived_quantities(primaire en secundaire grootheden)
```

```
subroutine get_primary_quantities(primaire grootheden)

Vraag aggregaat op via oms_dsp_get met label/datasetnaam 'm_velocity'
Vraag referentie op naar item 'Values' van agg_u
Kopieer waarden van (double precision) 'Values'-array naar (Delft3D-FLOW flexible precision) u1-
array
Geef aggregaat vrij door middel van oms_agg_destroy

... analoog voor andere snelheidscomponent v1, waterstand s1, en debieten qxx, en qyk
```

```
subroutine compute_derived_quantities(primaire en secundaire grootheden)

umean = gemiddelde van u1 (in geval van 2D: umean = u1)
vmean = gemiddelde van v1 (in geval van 2D: vmean = v1)
Voer droogvalcontrole uit (call drychk)
Bereken waterdieptes in snelheidspunten (call upwhu)
```

```
subroutine dps_to_backbone(bodemligging in de waterstandspunten)

Verkrijg/activeer aggregaat agg_dps
Vraag referentie op naar item 'Values' van agg_dps (oms_agg_get_reference)
Kopieer waarden van dps-array naar (double precision) 'Values'-array
Pas item 'Time' aan
Stuur aggregaat weg via oms_dsp_put met label/datasetnaam 'dps'
```

3.4.3 Afbouwfase

Tijdens de afbouwfase worden twee stappen onderscheiden, namelijk het opruimen aggregaten en het beëindigen van de Backbone. Het afbreken van de aggregaten gaat met behulp van `oms_agg_destroy`. De verbinding met de Backbone wordt ten slotte afgesloten met `oms_deactivate` en `oms_stop`.

3.5 Technisch ontwerp aspecten backbone

De problemen die in eerdere projecten geconstateerd werden bij het combineren van de OMS backbone met de licentiecontrole van Delft3D bleek te worden veroorzaakt doordat de MPI omgeving environment variabelen en netwerkschijf definities niet automatisch doorgeeft aan de aangeroepen executables. Dit kan worden verholpen door deze definities expliciet op te geven via de commandline parameters van de MPI omgeving onder Windows. Een en ander kan onder Linux op vergelijkbare manier aangepakt worden. Na een aantal kleine aanpassingen in de backbone code uitgevoerd in OMS kader door VORtech is het gelukt om de OMS backbone op WL onder Linux aan de praat te krijgen en om WAQUA en Delft3D-FLOW met elkaar te laten communiceren via de backbone.

Bij het installeren van SIMONA is gebleken dat gebruik van de dummyversie COCDUM van COCLIB problemen geeft in het programma WAQPRE. Dit programma gebruikt laagniveau routines van COCLIB die een 'handle' teruggeven naar een dataobject. In COCDUM zijn alle routines van COCLIB leeg gemaakt om ervoor te zorgen dat er geen PVM wordt gebruikt. Voor de betreffende laagniveau routines leidt dit ertoe dat een handle ongeïnitieerd blijft, wat later een coredump geeft. Dit probleem wordt omzeild door bij het compileren van WAQPRE toch COCLIB te gebruiken en PVM mee te linken. Dat geeft geen problemen omdat de OMS backbone in WAQPRE niet wordt gebruikt.

Bij het compileren van WAQPRO kan worden gekozen tussen het gebruiken van COCLIB en COCDUM. Wanneer COCLIB wordt gebruikt dan moet PVM mee worden gelinkt. Dat op zich geeft geen conflicten met het gebruik van MPI in de OMS backbone. De problemen met het gebruik van parallel rekenen zitten in het opstarten van het totale systeem en in het ontbreken van support voor parallelle berekeningen in de OMS backbone. Bij het opstarten zouden zowel MPI als PVM moeten worden opgestart, en daar is in de OMS backbone nog geen procedure voor uitgewerkt. En voor het ondersteunen van parallel rekenen in de OMS backbone moet er een klein programmaatje worden geschreven dat de stromingstoestand per WAQUA subdomein samenvoegt voordat die aan Delft3D-FLOW wordt gecommuniceerd. Aangezien we in dit project parallel rekenen buiten beschouwing konden laten, hebben we zonder problemen COCLIB kunnen gebruiken. Vanwege consistentie met WAQPRE is COCLIB ook gebruikt bij het compileren van WAQPRO. Voor toekomstig gebruik gelden de bovengenoemde aandachtspunten.

Voor het opstarten van het gekoppelde systeem zijn een script en meerdere configuratiefiles nodig. Als eerste geven we een script voor het opstarten van de run:

```
#!/bin/sh
#
workdir=`pwd`
#
# general settings for Delft3D
export delft3d_path=/p/m3822-waqua-mor/coupled_simona_delft3d/delft3d/bin/wlinux
export delft3d_workdir=$workdir/delft3d_input
export DHSDELFT_LICENSE_FILE=/f/wlhost.WL/library/app/flexlm/ds_flex
export D3D_HOME=/u/gensebe/delft3d
#
# general settings for WAQUA
export SIMONADIR=/p/m3822-waqua-mor/coupled_simona_delft3d/simona
export waqua_path=$SIMONADIR/bin
export waqua_workdir=$workdir/waqua_input
export UI_NAME=linux
export ENVIRONMENT=BATCH
export PATH=${SIMONADIR}/bin:${PATH}
cp $SIMONADIR/bin/waqpro.exe $waqua_workdir
#
delft3d_runid=wlg
waqua_runid=waal
exp=wlw
#
# preparing input for Delft3D run
cd $delft3d_workdir
echo $delft3d_runid > runid
$delft3d_path/tdatom.exe
cd $workdir
```

```

#
# preparing input for WAQUA run
cd $waqua_workdir
#
waqpre.run -input siminp.$exp -runid $waqua_runid -ndom 1 -bufsize 10 -back no
cd $workdir
#
echo '# LAM application schema' > lammpi.cfg
echo n0 -wd $waqua_workdir $waqua_path/waqpro.run -runid $waqua_runid -exp $exp -npart 1 -
ndom 1 -bufsize 10 -back no >> lammpi.cfg
echo n0 -x DHSDELFT_LICENSE_FILE -wd $delft3d_workdir $delft3d_path/trisim.exe >> lammpi.cfg
#
# starting up LAM-MPI
lamboot lamhosts
#
# starting up coupled Delft3D WAQUA run with mpirun
mpirun lammpi.cfg
#
# finishing LAM-MPI
lamhalt

```

Hierbij geeft de optie `-x DHSDELFT_LICENSE_FILE` aan dat de betreffende environment variabele doorgegeven moet worden aan het aangeroepen proces (te weten Delft3D voor licentie controle).

De machine-configuratiefile 'lammpi.cfg' voor LAM-MPI wordt door voorgaand script automatisch gegenereerd en ziet er voor het bovenstaande script als volgt uit:

```

# LAM application schema
n0 -wd /p/m3822-waqua-mor/test_jagers/case2-Waal/coupled-WAQUA/waqua_input /p/m3822-waq▶
  ▶ua -mor/coupled_simona_delft3d/simona/bin/waqpro.run -runid waal -exp wlw -npart 1 -ndo▶
  ▶m 1 -buf size 10 -back no
n0 -x DHSDELFT_LICENSE_FILE -wd /p/m3822-waqua-mor/test_jagers/case2-Waal/coupled-WAQ▶
  ▶UA/delft3d_input /p/m3822-waqua-mor/coupled_simona_delft3d/delft3d/bin/wlinux/trisim.exe

```

De eerste regel hierin geeft aan hoe WAQPRO opgestart moet worden, de tweede regel zorgt voor het opstarten van Delft3D-FLOW. In een run met OMS kunnen meerdere communicatiemechanismes naast elkaar worden gebruikt (in-memory, via MPI). Welk(e) mechanisme(s) wordt (worden) gebruikt moet in een configuratiefile 'exchange.cfg' worden gespecificeerd. Dit bestandje ziet er in ons geval als volgt uit:

```

# This file defines the exchange configuration and its parameters
#
# The format of each line in this file is
# <Exchange_type> <space> <Exchange_name> [<space> <Parameter(s)>]
#
# <Exchange_type> must be numeric.
# <Exchange_name> may not contain space or tab character(s).
#
# You may currently choose from 2 exchange types:
# 1: In Memory Exchange
# 2: MPI Exchange; add first one buffer size and then for each node its name as parameters.
#
2 mpi 1024000 waqpro.exe trisim.exe

```

In ons geval hebben we dus één communicatiemechanisme dat we mpi noemen. Hierbij dient opgemerkt te worden dat de '2' aan het begin van deze regel aangeeft dat de koppeling via MPI zal lopen, de tekst 'mpi' definieert de naam van het communicatiekanaal maar zegt zelf niets over de wijze van communicatie. De eerste parameter na de naam van het communicatiekanaal (in het voorbeeld: 1024000) geeft aan hoe groot de grootste MPI-message maximaal wordt die we gaan versturen tijdens de run. Bij het communiceren van één grootte per keer zal de buffer de grootte van $M_{MAX} * N_{MAX} * 8$ bytes moeten hebben uitgaande van data uitwisseling in dubbele precisie plus de overhead van de meta-informatie. Voor een 3D simulatie moet de buffer K_{MAX} keer zo groot zijn.

De resterende parameters zijn namen die we toekennen aan de rekenprocessen die worden opgestart. Hiermee wordt aan de eerste door mpiexec opgestarte MPI thread (waqpro.run in bovenstaand voorbeeld) de naam 'waqpro.exe' toegekend, en aan de tweede MPI thread (in ons geval trisim.exe) de naam 'trisim.exe'. Tenslotte moeten de communicaties tussen de rekenprocessen worden gespecificeerd in het bestand 'link.cfg':

```
# This file defines the definition of all communication points.
#
# The format of each line in this file is
# <Commpoint_name> <sp> <Exchange_name> [<sp> <Source_node> <sp> <Target_node(s)>]
#
# No string may contain space or tab character(s).
#
nsteps          mpi      waqpro.exe      trisim.exe
m_velocity      mpi      waqpro.exe      trisim.exe
n_velocity      mpi      waqpro.exe      trisim.exe
waterlevel      mpi      waqpro.exe      trisim.exe
m_discharge     mpi      waqpro.exe      trisim.exe
n_discharge     mpi      waqpro.exe      trisim.exe
dps             mpi      trisim.exe      waqpro.exe
```

De namen in het link configuratie bestand verwijzen via het exchange configuratie bestand naar de executables opgestart door middel van de mpiexec aanroep. Bovenstaande is uitgaande van communicatie per data set. Het alternatief om de snelheden, waterstand en debieten gebundeld in één communicatiemoment uit te wisselen, zou als voordeel hebben dat het aantal communicatiemomenten verminderd zou worden. Het heeft echter als nadeel dat de buffer benodigd voor de communicatie ook significant groter moet zijn en de koppeling is minder flexibel en generiek. Daarom is ervoor gekozen om de communicatie te laten verlopen per grootte; dit lijkt in de praktijk ook goed te werken.

Opmerkingen:

- Via de OMS put en get messages wordt de synchronisatie van de simulaties automatisch geregeld mits de communicatie in twee richtingen verloopt (zoals hier: stromingsveld van WAQUA naar Delft3D, nieuwe bodemligging van Delft3D naar WAQUA). Wanneer we te maken hebben met éénrichtingscommunicatie (bijv. alleen het stromingsveld van WAQUA naar Delft3D, maar nog geen terugkoppeling van de bodemverandering) lopen we het risico dat de leverende partij de gegevens sneller aanbiedt dan de ontvangende partij ze kan verwerken. In dat geval kan er een buffer overflow optreden in de backbone.

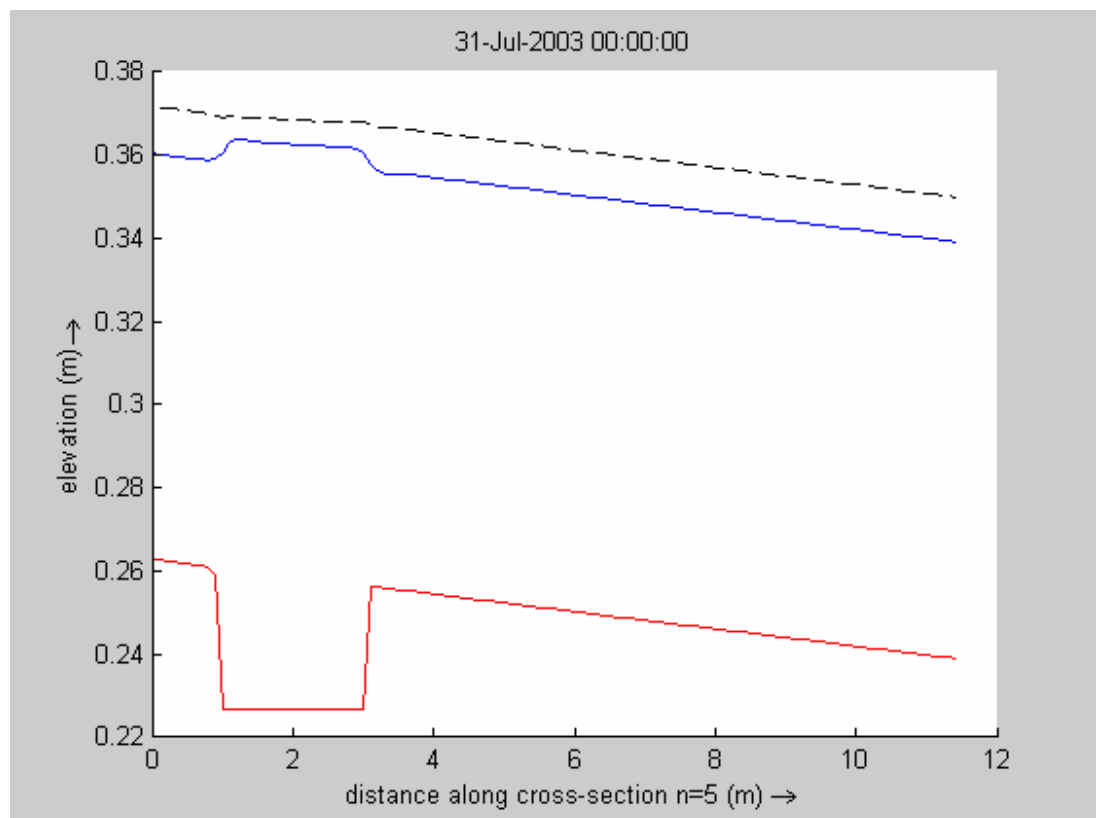
- De 'link.cfg' en 'exchange.cfg' bestanden worden gelezen door de OMS backbone en dienen daarom in de werkdirectories van beide afzonderlijke executables (WAQUA resp. Delft3D) te staan. Wanneer deze bestanden niet worden gevonden, neemt de OMS backbone aan dat alle communicatie 'in memory' verloopt; de data lijkt dan goed verstuurd te worden, maar komt dan nooit bij het andere programma aan. Het 'lammpi.cfg' bestand daarentegen wordt slechts gebruikt door de LAM-MPI omgeving om de afzonderlijke executables op te starten en dient dus op het hogere overkoepelende niveau te staan van waaruit de executables via MPI worden opgestart.

4 Rechte goot

4.1 Inleiding

De eerste testcase die we hebben gebruikt is een model van een ruim 11 m lange en 0.4 m brede goot met een kleine waterdiepte van 10 cm en een totaal verval van 2.4 cm. Op een afstand van 1 tot 3 m van de bovenrand van het model is een verdieping aangebracht in de bodem van ongeveer 3 cm. Figuur 3 toont de beginconditie van de simulatie; de figuur toont de bodemligging en het waterstandsverloop in lengterichting van de goot. Naast het globale waterstandsverhang dat overeenkomt met het bodemverhang merken we op dat zich boven de lokale verdieping van de bodem zich een verhoging van de waterstand bevindt. Deze verhoging is als volgt te verklaren. In een kanaal met constant bodemverhang en constant debiet ontstaat een evenwichtsstroming waarbij de gradiënt van de snelheid u in tijd en plaats gelijk aan 0 is. Uit de impulsvergelijking volgt dan dat drukterm (gerepresenteerd door de waterstandsgradiënt) gelijk is aan de bodemwrijvingsterm:

$$\frac{\partial u_0}{\partial t} + u_0 \frac{\partial u_0}{\partial x} = -\frac{g u_0^2}{C^2 h_0} - g \frac{\partial z_{w0}}{\partial x}$$



Figuur 3: Beginconditie van de simulatie. Getoond zijn de bodemligging (rode lijn), de bijbehorende evenwichtswaterspiegel (blauwe lijn) en het verloop van de energiehogte (zwarte onderbroken lijn).

waarbij g de zwaartekrachtsconstante, z_{w0} de lokale waterstand (gelijk aan de bodemligging z_b plus de waterdiepte h_0) en u_0 de lokale stroomsnelheid is. Hieruit volgt de bekende Chézy formulering:

$$C = u_0 \sqrt{h_0 i}$$

waarbij i gelijk is aan de evenwichtsgradiënt in de waterstand. Wanneer we nu naar een kanaal met een kuil kijken, kunnen we alle grootheden splitsen in een term volgens de voorgaande formules voor het uniforme kanaal aangeduid met een subscript 0 en een variatie daarop ten gevolge van variaties in de lokale bodemligging (aangegeven met een accent), ofwel $u = u_0 + u'$, $h = h_0 + h'$ en $z_w = z_{w0} + z_w'$. De impulsvergelijking wordt dan:

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = - \frac{g (u_0 + u')^2}{C^2 (h_0 + h')} - g \frac{\partial z_{w0}}{\partial x} - g \frac{\partial z_w'}{\partial x}$$

Als de afwijking klein is kunnen we de afwijkingen in de bodemwrijvingsterm verwaarlozen en vallen de eerste twee termen in het rechter lid op basis van voorgaande analyse tegen elkaar weg. We houden dan de volgende vergelijking over:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} = -g \frac{\partial z_w'}{\partial x} \quad \text{ofwel} \quad \frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = -g \frac{\partial z_w'}{\partial x}$$

Dit is de differentiaalvorm van de wet van Bernouilli bij constante druk p_{atm} die we ook bij verwaarlozing van de bodemwrijving voor een horizontale refentiebodembodem zouden krijgen. In het algemeen wordt de vergelijking geschreven als:

$$E = \frac{u^2}{2g} + z_w' = \text{constant}$$

Vanwege massabehoud geldt bij een constant debiet q dat $u = q/h$ zodat we de voorgaande formule kunnen herschrijven tot:

$$\frac{q^2}{2gh^2} + h' + z_b' = \text{constante}$$

waarbij z_b' de verstoring van het oorspronkelijke bed onder constant verhang is, ofwel

$$\frac{q^2}{2gh^2} + h + z_b' = \text{constante}$$

aangezien h_0 een constante is en dus zonder geldigheid van de vergelijking te verliezen toegevoegd kan worden.

Gedifferentieerd in x richting levert dit bij een constant debiet q :

$$\left(-\frac{q^2}{gh^3} + 1\right) \frac{dh}{dx} + \frac{dz'_b}{dx} = 0$$

ofwel na terugtransformatie met $u = q/h$ en het invoeren van het Froude getal $Fr^2 = u^2/gh$ krijgen we dan de volgende relatie tussen de gradiënt in de lokale waterdiepte en de gradiënt in de bodemligging:

$$\frac{dh}{dx} = -\frac{1}{1 - Fr^2} \frac{dz'_b}{dx}$$

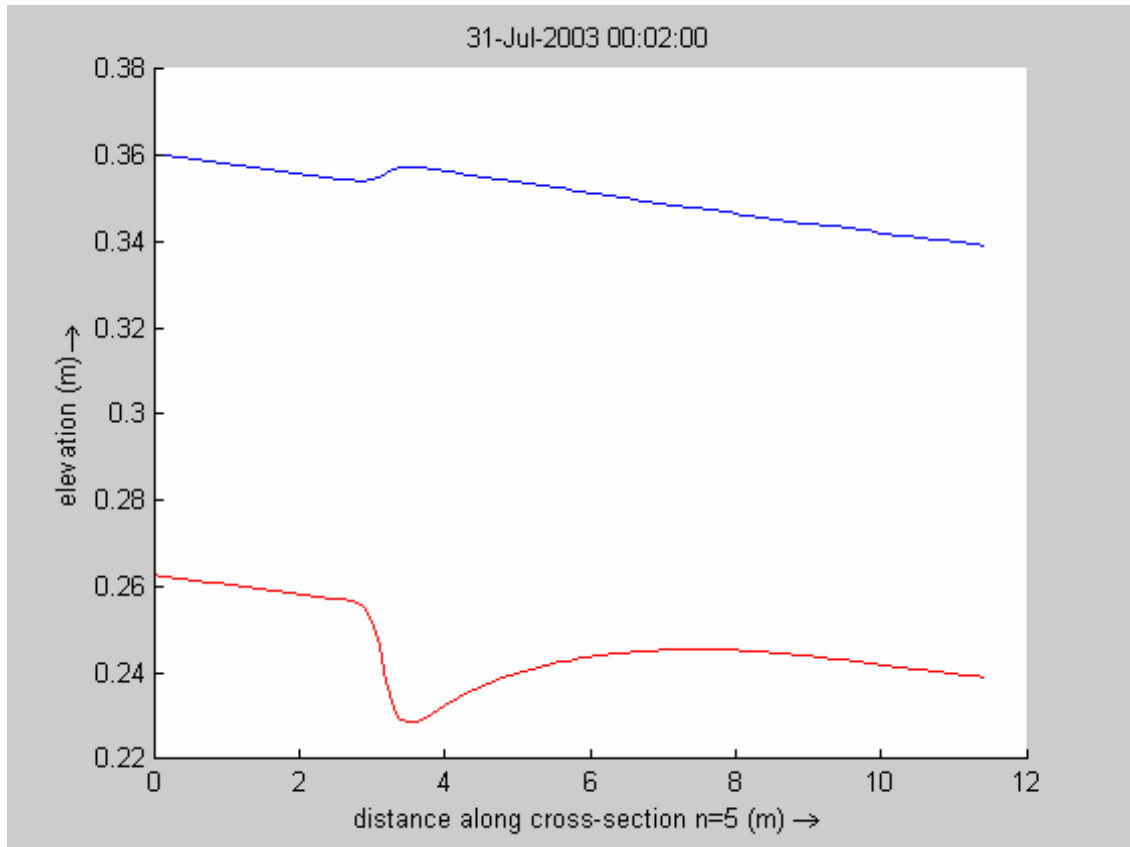
Hieruit volgt tenslotte dat:

$$\frac{dz'_w}{dx} = \frac{dz'_b}{dx} + \frac{dh}{dx} = -\left(\frac{Fr^2}{1 - Fr^2}\right) \frac{dz'_b}{dx}$$

Deze formule leert ons dat voor subkritische stromingen ($Fr < 1$) het waterstandsverhang tegengesteld is aan het bodemverhang terwijl beide verhangen voor superkritisch stroming ($Fr > 1$) hetzelfde teken hebben. De simulatie die we nu testen betreft zoals in de Nederlandse rivieren gebruiken subkritische stroming (om precies te zijn: de snelheid 0.34 m/s ter plaatse van de verdieping en 0.46 m/s daarbuiten komen overeen met Froude getallen van 0.3 en 0.47) en dus loopt de waterstand lokaal op.

4.2 Referentiesimulatie Delft3D-FLOW

De bodemruwheid wordt gekenmerkt door een constante Chézy waarde van $32 \text{ m}^{1/2}/\text{s}$, de viscositeit is conform de schaal van het gootje klein, namelijk $0.001 \text{ m}^2/\text{s}$. De simulatie omvat 100 tijdstappen van 0.02 min; de totale simulatieperiode komt dus overeen met slechts 2 minuten. De morfologische simulatie omvat twee (identieke) sedimentfracties om aan te geven dat alle mogelijkheden van online morfologie beschikbaar zijn. De verdieping die initieel tussen de 1 en 3 m van de bovenstroomse rand ligt verplaatst zich tijdens de toch zeer korte simulatie over een afstand van zo'n 2 m in benedenstroomse richting. Tijdens deze verplaatsing blijft de bovenstroomse rand van de kuil behouden als een steil front en ontwikkelt zich aan de benedenstroomse rand een expansiegolf. Figuur 4 toont het resultaat aan het eind van de referentiesimulatie uitgevoerd met alleen Delft3D-FLOW: de kuil verschuift naar benedenstrooms en de waterspiegel verhoging verschuift en vervormt mee.



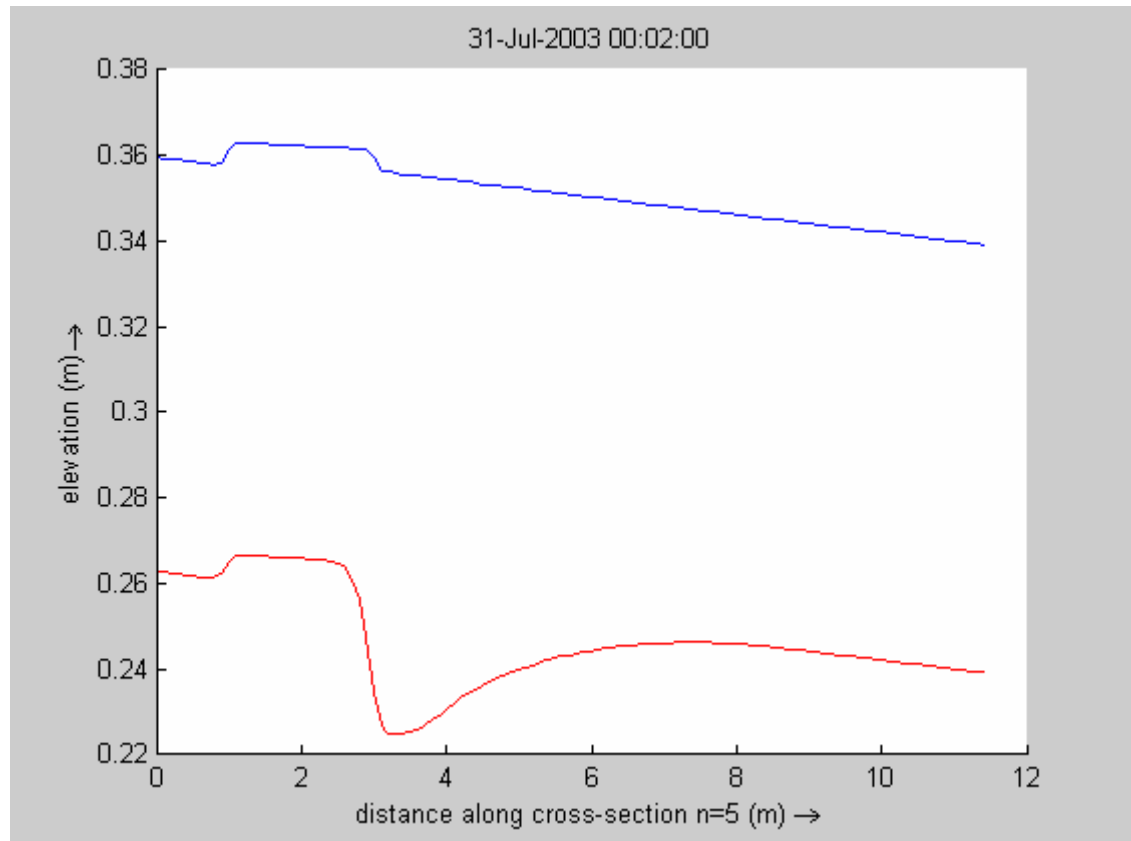
Figuur 4: Eindresultaat van de simulatie met alleen Delft3D-FLOW. Getoond zijn de bodempligging (rode lijn) en bijbehorende waterspiegel (blauwe lijn) na 2 minuten morfologische ontwikkeling.

4.3 Gekoppelde simulatie WAQUA - Delft3D-FLOW

Hoewel we er uiteindelijk goed in geslaagd zijn om WAQUA en Delft3D-FLOW te koppelen met betrekking tot morfologie, liepen we door de gefaseerde uitvoering tegen een aantal problemen aan. Omdat die problemen wel illustratief zijn voor het type problemen dat je tegen kunt komen bij dit soort koppeling, volgt hieronder een chronologische beschrijving van de ontwikkeling.

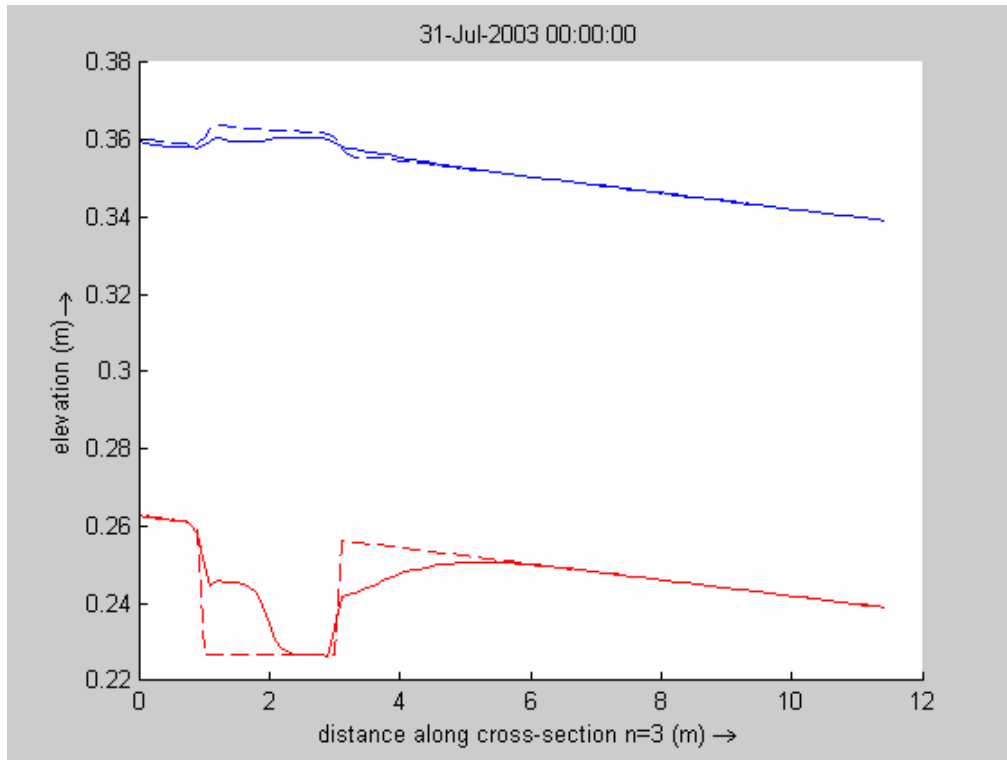
Het resultaat na de eerste stap van de implementatie van de WAQUA-morfologiekoppeling wordt getoond in Figuur 5. We zien dat de kuil zich in benedenstroomse richting verplaatst op vergelijkbare wijze als in Delft3D-FLOW standalone. Echter de waterspiegelverhoging verplaatst zich niet met de kuil mee en ter plaatste van die verhoging vindt aanzanding plaats (de waterstand verandert wel een klein beetje). Dit wordt veroorzaakt doordat in de eerste stap alleen de primaire grootheden (waterstanden, snelheden en bodempligging in waterstandspunten) werden uitgewisseld, maar de secundaire grootheden (de bodempligging en waterdieptes in de snelheidspunten) nog niet werden aangepast. De d_{pu}/v bodempligging is van belang voor de momentumvergelijking welke uiteindelijk belangrijker voor het gedrag van de waterbeweging is dan de bodempligging in de waterstandspunten die via de continuïteitsvergelijking eigenlijk alleen invloed heeft op het droogvallen van ondiepe gebieden. De waterdiepte in de snelheidspunten bepaalt namelijk het doorstroomoppervlak en daardoor effectief de snelheden die in de bodemwrijvingsterm gebruikt worden: een kleinere waterdiepte in de snelheidspunten leidt daardoor tot lagere snelheden. Doordat de

waterdieptes in de snelheidspunten van WAQUA niet aangepast werden omdat de verandering in de bodemligging niet door kwam, veranderde de waterstand berekend door WAQUA niet. De waterdiepte in de waterstandspunten is uiteindelijk maatgevend voor de snelheden die in de sedimenttransportformules van Delft3D-FLOW gebruikt worden. Doordat de waterstand lokaal hoger ligt, rekent Delft3D-FLOW lagere effectieve snelheden in de waterstandspunten uit en daardoor een lager sedimenttransport hetgeen uiteindelijk tot aanzanding leidt. Dit verklaart waarom de bodem zoals berekend door Delft3D-FLOW de verhoging in de waterstand moet volgen om tot een evenwicht te komen (sedimenttransport constant in x richting).



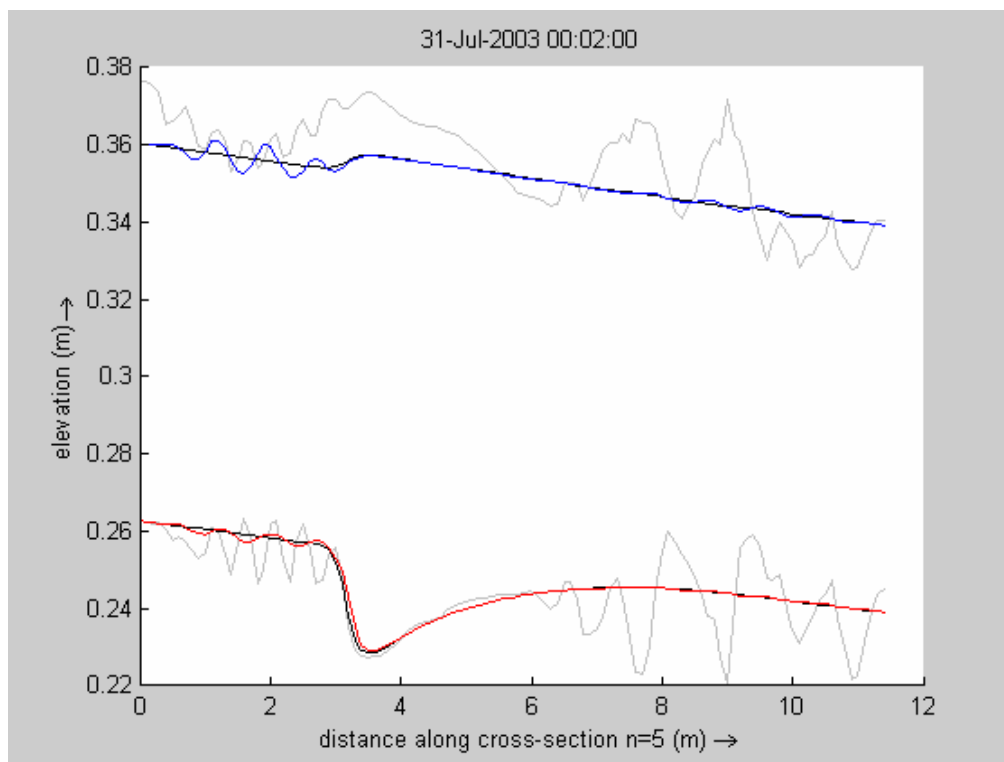
Figuur 5: Eindresultaat van de simulatie met waterbeweging berekend door WAQUA en bodemligging door de online morfologiemodule van Delft3D-FLOW koppeling via OMS backbone via MPI zonder aanpassing van de secundaire grootheden. Getoond zijn de bodemligging (rode lijn) en de bijbehorende evenwichtswaterspiegel (blauwe lijn).

Na correctie van de secundaire grootheden bleef de kuil nog voor de helft liggen (zie Figuur 6). Uiteindelijk bleken dus zowel de waterdieptes in de snelheidspunten van WAQUA als die in Delft3D-FLOW een rol te spelen bij het verkrijgen van het resultaat getoond in Figuur 5: alleen omdat WAQUA en Delft3D-FLOW dezelfde fout maakten voor de waterdiepte in de snelheidspunten was de migratie van de kuil correct. Volgens de tabel in paragraaf 2.3 worden HU en HV vlak na de waterbewegingsstap (intern via ADI of extern via `flow_from_backbone`) opnieuw bepaald; de routine UPWHU wordt immers aangeroepen. Hieruit was in eerste instantie geconcludeerd dat de waterdieptes al geüpdatet zouden worden.



Figuur 6: Resultaat na een kwart van de gekoppelde simulatie na het aanpassen van de waterdieptes in de snelheidspunten (HU en HV) in WAQUA maar nog niet in Delft3D-FLOW. De kuil blijft half liggen (onderbroken lijnen tonen initiële conditie).

Nadere analyse van de Delft3D-FLOW code toonde uiteindelijk aan dat de nieuwe waarden niet in de verwachte HU en HV arrays belandden maar slechts in workarrays. De aanpassing van de HU en HV arrays vond in Delft3D-FLOW dus nog niet plaats (in de standaard Delft3D-FLOW code worden HU en HV in de ADI routine aangepast). Nu deze secundaire grootheden (alsmede de daarvoor benodigde dieptegemiddelde snelheden UMEAN en VMEAN) ook in Delft3D-FLOW aangepast worden, verplaatst de kuil zich ook in de gekoppelde simulatie op de fysisch correcte wijze. Figuur 7 toont het eindresultaat van de Delft3D-FLOW simulatie evenals het resultaat van de gekoppelde simulatie. Het resultaat van de gekoppelde simulatie wordt stabiel als de tijdstap wordt verkleind van 0.02 minuut naar 0.01 minuut en de viscositeit wordt vergroot van 0.001 naar 0.005 m²/s, maar er treden nog wel een aantal oscillaties op in zowel de berekende bodem als waterstand.



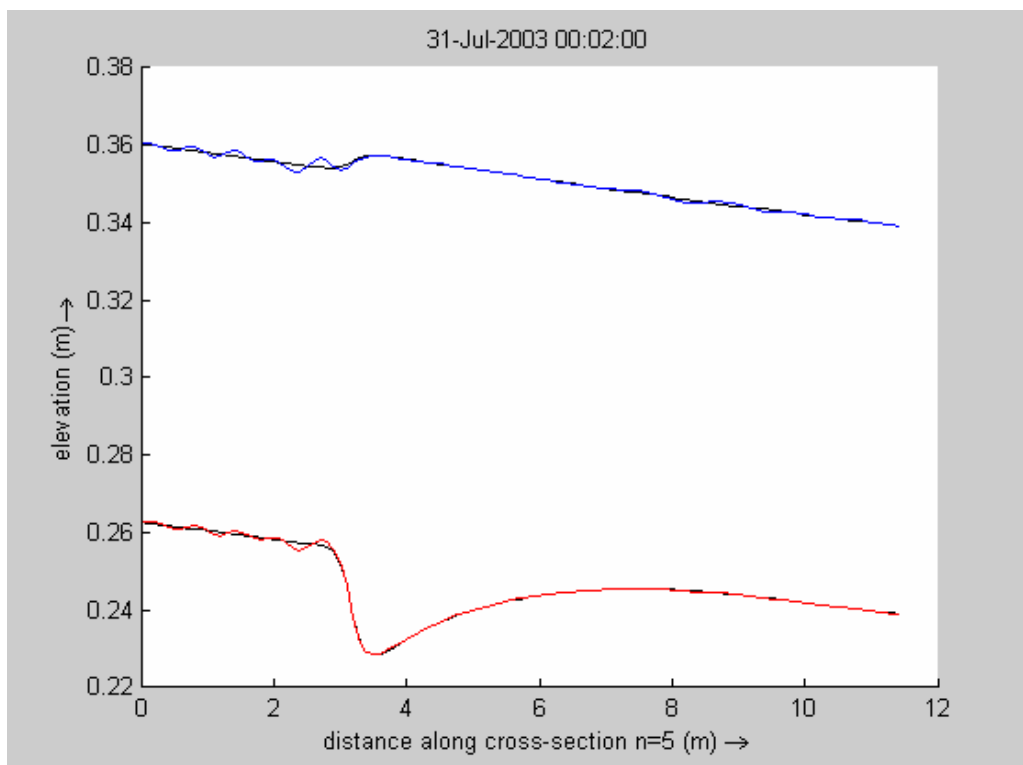
Figuur 7: Vergelijking Delft3D-FLOW standalone resultaat (zwarte lijnen) en WAQUA-Delft3D gekoppeld resultaat (grijze lijnen: zonder reductie van tijdstap en vergroting viscositeit; rode en blauwe lijn na aanpassing van tijdstap en viscositeit).

4.4 Analyse slingeringen

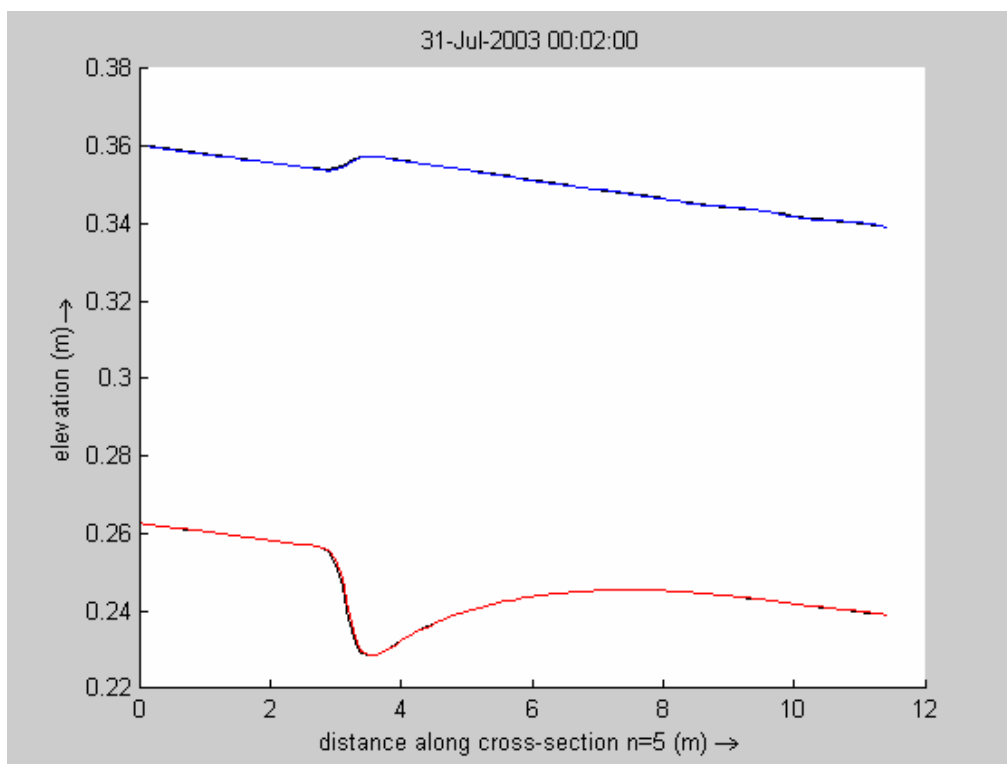
De oorzaak van de oscillaties in de gekoppelde simulatie ligt in het andere numerieke schema van WAQUA voor de impulsvergelijking. Om dit aan te tonen zijn twee extra simulaties uitgevoerd.

1. Allereerst is in Delft3D-FLOW de impulsvergelijking volgens WAQUA discretisatie aangezet. Figuur 8 toont dat wanneer we dit doen, we ook in Delft3D-FLOW de viscositeit moeten verhogen om een stabiel resultaat te verkrijgen; het uiteindelijke resultaat lijkt sterk op het resultaat van de met WAQUA gekoppelde simulatie getoond in Figuur 7.
2. Daarna is de koppeling met het SIMONA programma WAQPRO uitgebreid zodanig dat zij ook werkt voor een TRIWAQ model met één laag. Figuur 9 toont het resultaat van een gekoppelde simulatie van TRIWAQ met Delft3D-FLOW zonder aanpassing van de tijdstap en/of de viscositeit. Afgezien van een zeer kleine slingingering in het benedenstroomse gedeelte van de goot is het resultaat identiek aan dat van Delft3D-FLOW standalone.

Het resultaat van de laatste simulatie is zeer goed te noemen.



Figuur 8: Vergelijking Delft3D-FLOW standalone met standaard discretisatie van de impulsvergelijking (zwarte lijnen) en Delft3D-FLOW met de WAQUA discretisatie van de impulsvergelijking (rode en blauwe lijn). In het geval van de WAQUA discretisatie moest de viscositeit worden vergroot van 0.001 tot 0.005 m²/s om het getoonde resultaat te verkrijgen (tijdstap niet verkleind).



Figuur 9: Vergelijking Delft3D-FLOW standalone resultaat (zwarte lijnen) en TRIWAQ-Delft3D gekoppeld resultaat (rode en blauwe lijn). Bij koppeling met TRIWAQ wordt zonder aanpassing van tijdstap en/of viscositeit een (vrijwel) stabiel resultaat verkregen.

4.5 Conclusies

In dit hoofdstuk zijn de eerste testen met het gekoppelde systeem beschreven. De testen laten zien dat de het gekoppelde systeem goede resultaten geeft die goed overeenkomen met die van Delft3D-FLOW standalone. De OMS backbone heeft hierbij na wat opstartproblemen goed gefunctioneerd. Er zijn verschillende problemen van numerieke aard aan de orde geweest. Enerzijds blijkt het van groot belang hoe er precies met "secundaire grootheden" wordt omgegaan. Anderzijds hebben subtiele verschillen tussen WAQUA, TRIWAQ en Delft3D-FLOW een rol gespeeld.

Op basis van deze 'simpele' testcase komen we tot de volgende conclusies:

- Het resultaat van de Delft3D-FLOW online morfologie module gekoppeld met een éénlaags TRIWAQ simulatie komt zeer goed overeen met het resultaat van een standalone Delft3D-FLOW simulatie met morfologie.
- Het resultaat van de Delft3D-FLOW online morfologie module gekoppeld met WAQUA komt voor deze testcase redelijk overeen met het Delft3D-FLOW standalone resultaat.
- Van de afwijkende numerieke discretisatie van de impulsvergelijking in WAQUA is bekend dat zij minder demping heeft, hetgeen eerder tot slingeren kan leiden. Dit is geverifieerd door de WAQUA discretisatie van de impulsbalans in Delft3D-FLOW te activeren; Delft3D-FLOW met de WAQUA discretisatie gaat ook slingeren.
- De koppeling met TRIWAQ is dus stabielere dan de koppeling met WAQUA. Hoewel dit niet altijd zo duidelijk naar voren hoeft te komen als in deze testcase, zal men bij studies naar het effect van ingrepen hiermee rekening moeten houden.
- De koppeling van een enkele precisie WAQUA/TRIWAQ executable met een dubbele precisie Delft3D-FLOW executable levert geen problemen op.

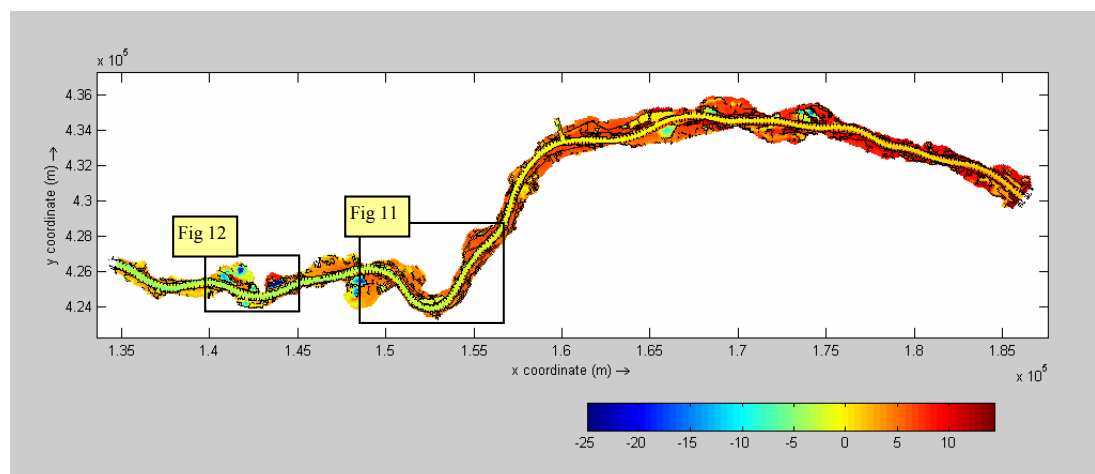
Op basis van de geslaagde simpele testcase is vervolgens besloten om verder te gaan met de praktijktesten voor Waal en Maas welke zijn beschreven in de volgende twee hoofdstukken.

5 Waal model

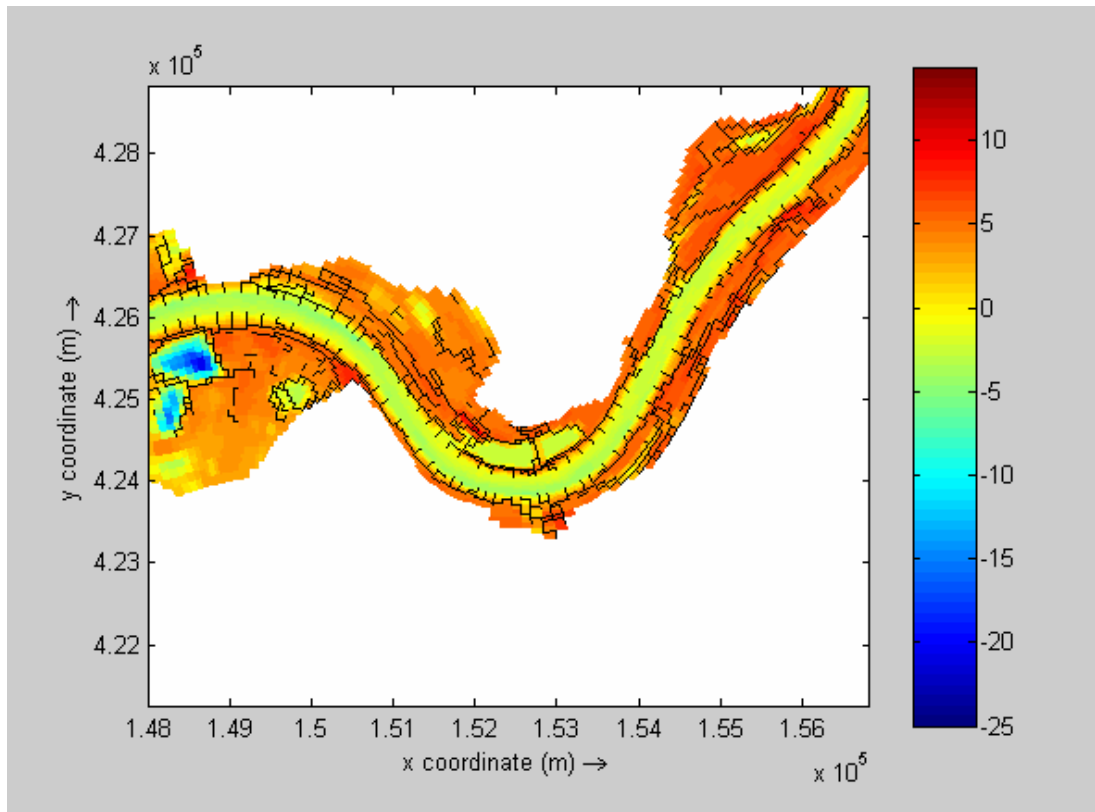
5.1 Inleiding

Als eerste praktijkmodel gebruiken we een 60 km lang model van de Waal van kmr 886 (net benedenstreams van Nijmegen) tot kmr 946 (tussen Herwijnen en Brakel). Dit model is het laatste jaar meerdere keren gebruikt voor studies in opdracht van RIZA naar het effect van nevengeulen (Afferdense- en Deestse Waarden, Gamerense Waard), achterloopse kribben en uiterwaardplannen bij Heesselt op de morfologie van het zomerbed. Daarbij is dit model gebruikt als Delft3D-MOR model waarbij de bodemligging in de roosterpunten wordt bepaald en niet zoals in de online morfologie module in de waterstandspunten. In het kader van dit project is het model overgezet van Delft3D-MOR naar Delft3D-FLOW met online morfologie module; dit is de eerste keer dat er zo grootschalig met de online morfologie module gerekend is voor een rivier. Figuren 10, 11 en 12 tonen het hele modelgebied en een tweetal deelgebieden. Bodemligging, ruwheden (trachytopen), overlaten, dunne dammen, observatie locaties en modelrand zijn afkomstig uit Baseline. In het model wordt een tijdstap van 0.5 minuut gebruikt, de gehanteerde viscositeit bedraagt $1 \text{ m}^2/\text{s}$, de simulatieduur voor de hydrodynamica betreft een periode van 2 dagen. In de Delft3D-FLOW simulatie is tenzij anders vermeld het effect van de spiraalstroming op de impulsbalans (van het primaire stroombeeld) meegenomen. De hydrodynamische simulaties zijn gedraaid vanuit een beginconditie met horizontale waterstand op 2.5 m+NAP.

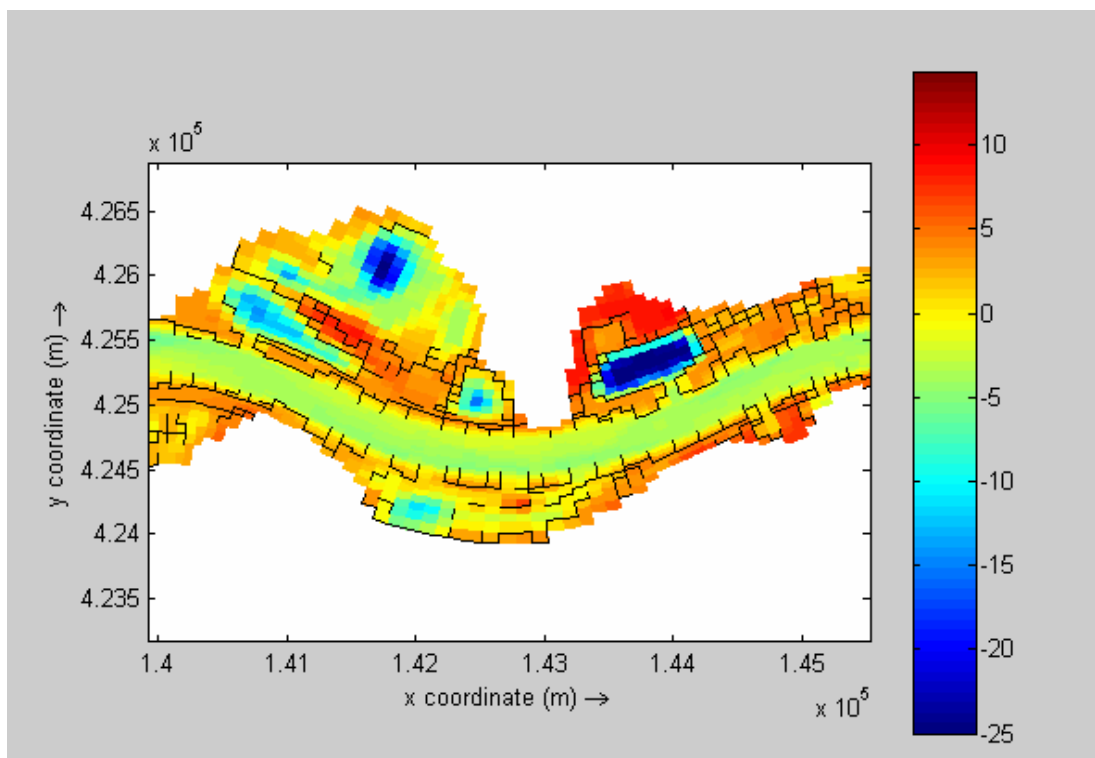
Vervolgens is dit model overgezet naar WAQUA en TRIWAQ door middel van Baseline projectie. Voor alle schematisaties is eerst een waterbewegingssimulatie uitgevoerd; Figuur 13 toont het waterstandsverloop in alle drie modellen bij een afvoer van $1600 \text{ m}^3/\text{s}$: de resultaten komen goed overeen, maar de waterstanden in het WAQUA model zijn iets lager dan die berekend door Delft3D-FLOW en TRIWAQ (zie Figuur 14).



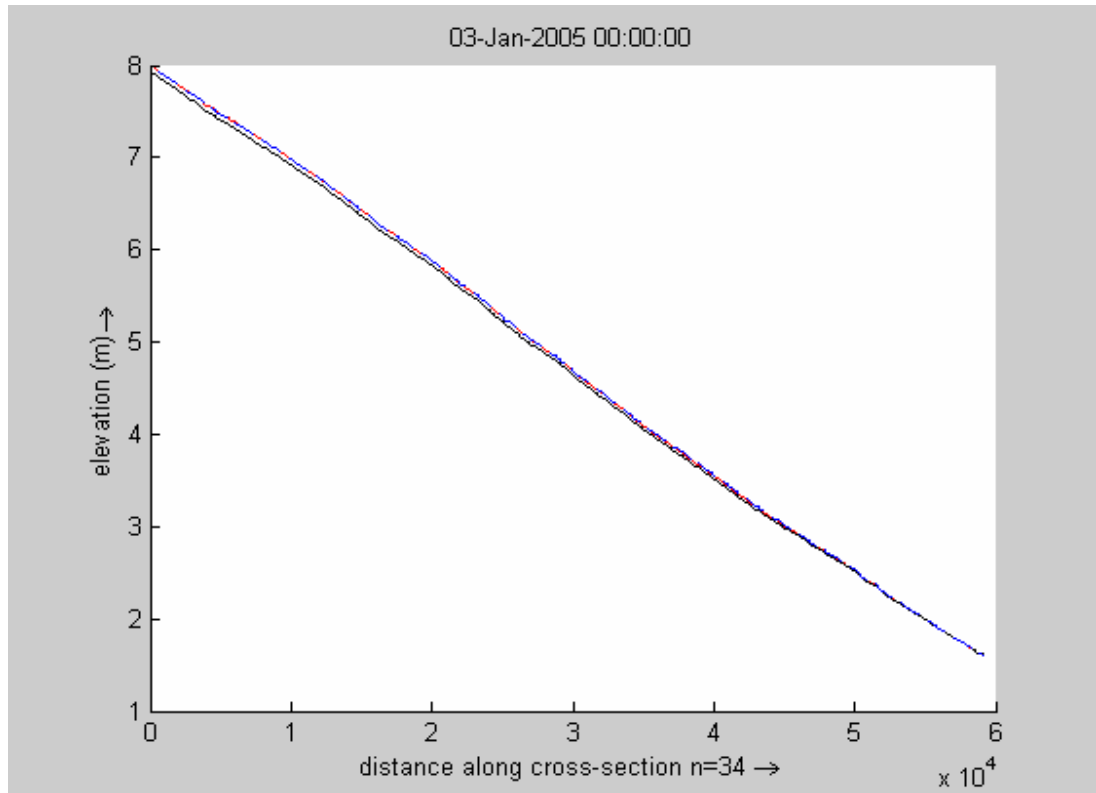
Figuur 10: Het hele modelgebied van de Waal. Ter oriëntering: rechts begint het model net benedenstreams van Nijmegen, het Amsterdam-Rijn kanaal sluit aan op het modelgebied rond x coördinaat 1.6×10^5 m bij Tiel.



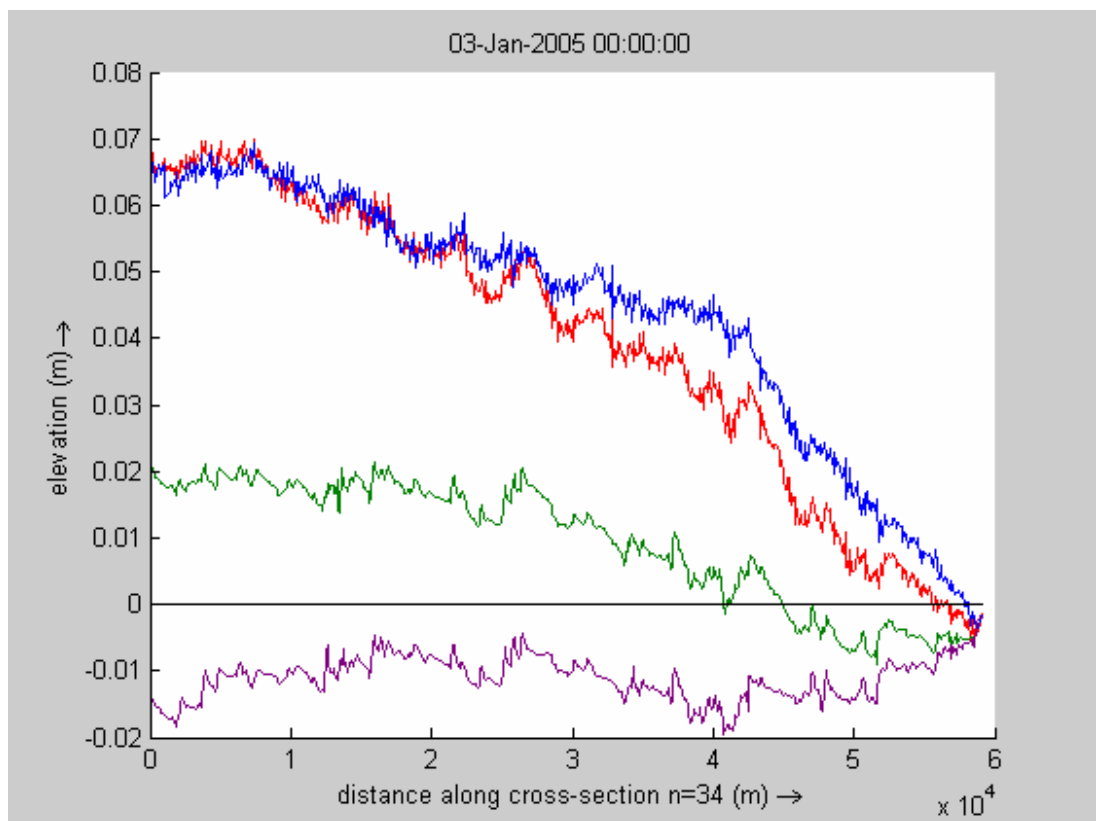
Figuur 11: Bocht bij de stuw St. Andries (verbinding met de Maas); in de binnen bocht liggen de Heesseltsche Uiterwaarden. In het zomerbed ligt in deze bocht een vaste (niet-erodeerbare) laag.



Figuur 12: Gamerense Waard net benedenstrooms van Zaltbommel.



Figuur 13: Rivierverhang in de drie simulaties: rood Delft3D, zwart WAQUA, blauw TRIWAQ.



Figuur 14: Relatief rivierverhang t.o.v. WAQUA: rood Delft3D standaard, blauw TRIWAQ, groen Delft3D met WAQUA discretisatie, paars Delft3D met WAQUA discr. zonder terugkoppeling van de spiraalstroming op de hoofdstroom via de impulsbalans.

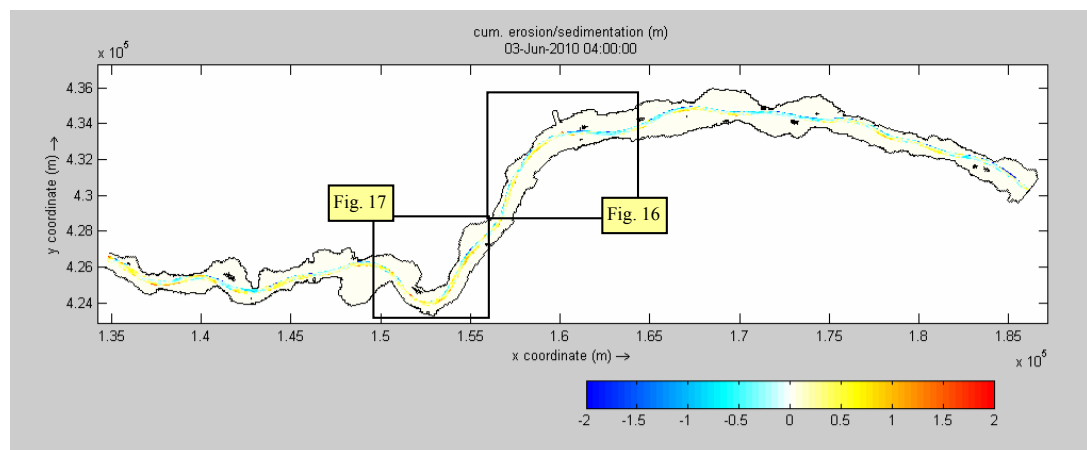
De laatste figuur verklaart tevens de orde van het verschil tussen Delft3D-FLOW en WAQUA: hierbij spelen zowel de discretisatie van de impulsvergelijking en het effect van de spiraalstroming op het primaire stroombeeld een rol. Opgemerkt dient te worden dat de TRIWAQ resultaten goed overeenkomen met de resultaten van Delft3D met standaard discretisatie en spiraalstroming, maar dat TRIWAQ geen spiraalstroming bevat; er moet dus nog een ander aspect een rol spelen.

5.2 Referentiesimulatie Delft3D-FLOW

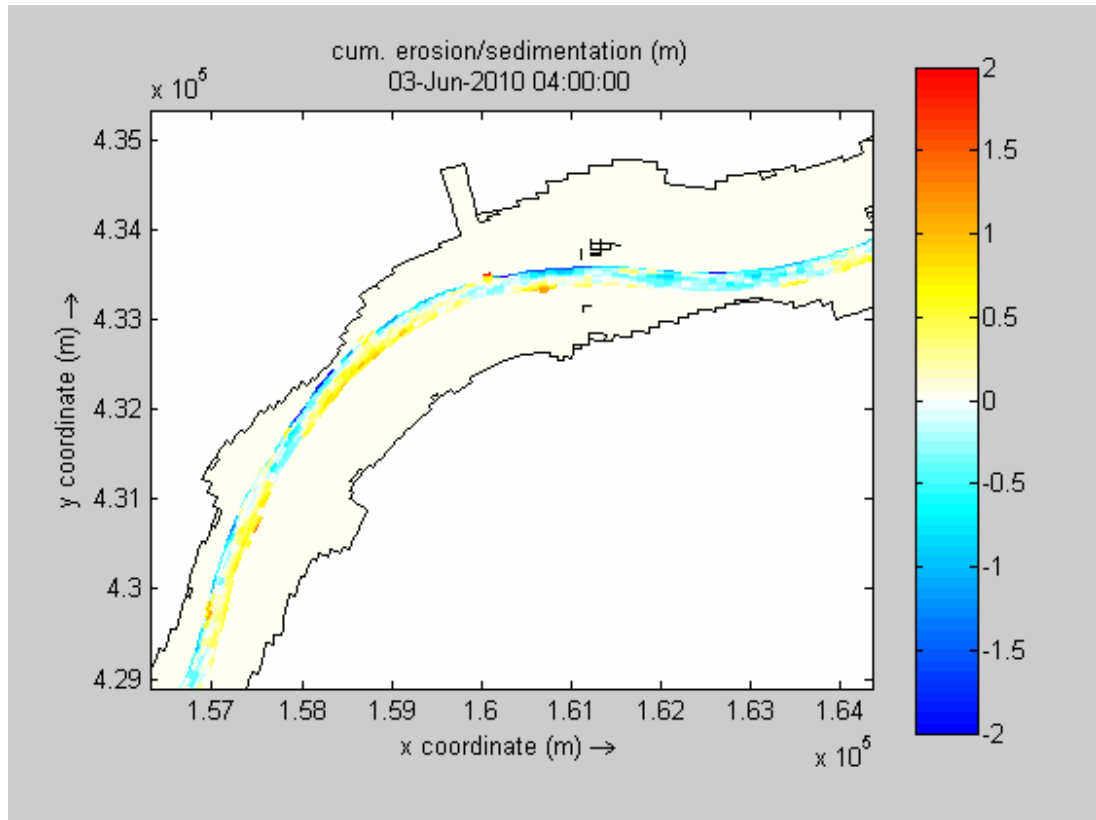
In de hier getoonde morfologische simulatie wordt een sediment fractie met D_{50} van 1 mm gebruikt waarvan de transportgrootte wordt berekend m.b.v. de Engelund-Hansen formulering; de uiterwaarden zijn morfologisch niet actief gemaakt door daar geen sediment neer te leggen. Hiervoor zijn twee redenen:

1. in de uiterwaarden treedt in het algemeen geen erosie op vanwege lage stroomsnelheden en vanwege bescherming door vegetatie;
2. de hoge ruwheden berekend op basis van de vegetatieformuleringen gebruikt in de uiterwaarden wordt het sedimenttransport onjuist berekend: de Chézy C waarde wordt in de sedimenttransportformules gebruikt om de dimensieloze bodemschuifspanning (Shields parameter) te bepalen. In deze analyse wordt ten onrechte aangenomen dat de gebruikte C waarde het resultaat is van alluviale beddingvormen. Voor een correcte afhandeling moet alluviale bodemruwheid en vegetatieruwheid gescheiden worden.

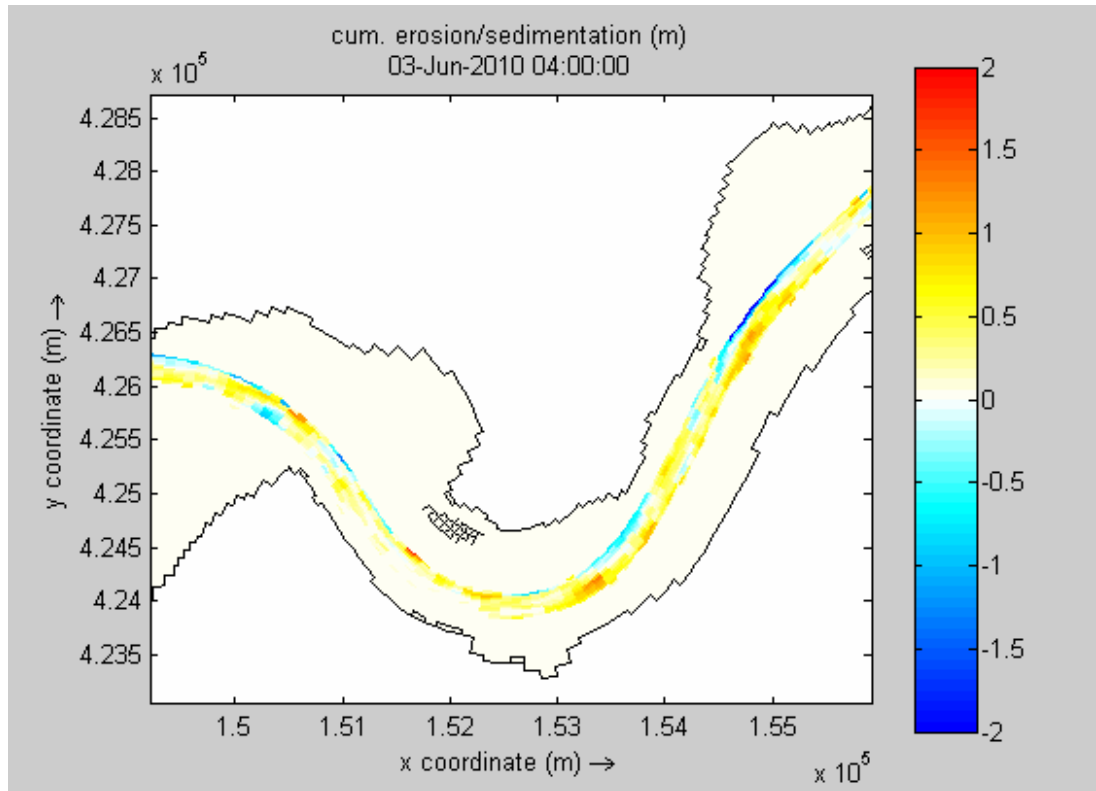
Het effect van de spiraalstroming op het sedimenttransport wordt meegenomen. Door middel van de zogeheten morfologische factor van 1000 wordt de tijdschaal van de hydrodynamica (2 dagen volgens de invoer) in de hier gepresenteerde simulaties opgeschaald tot een morfologische periode van 2000 dagen ofwel ongeveer 5.5 jaar. Figuur 15, 16 en 17 tonen een overzicht van de morfologische veranderingen tijdens die 5.5 jaar met de constante afvoer van $1600 \text{ m}^3/\text{s}$ berekend door Delft3D. De morfologische simulaties zijn doorgestart van de evenwichtstoestand berekend met de hiervoor beschreven hydrodynamische simulaties. Figuur 18 toont het verloop van de bodemligging langs beide oevers aan het begin en het eind van de referentiesimulatie.



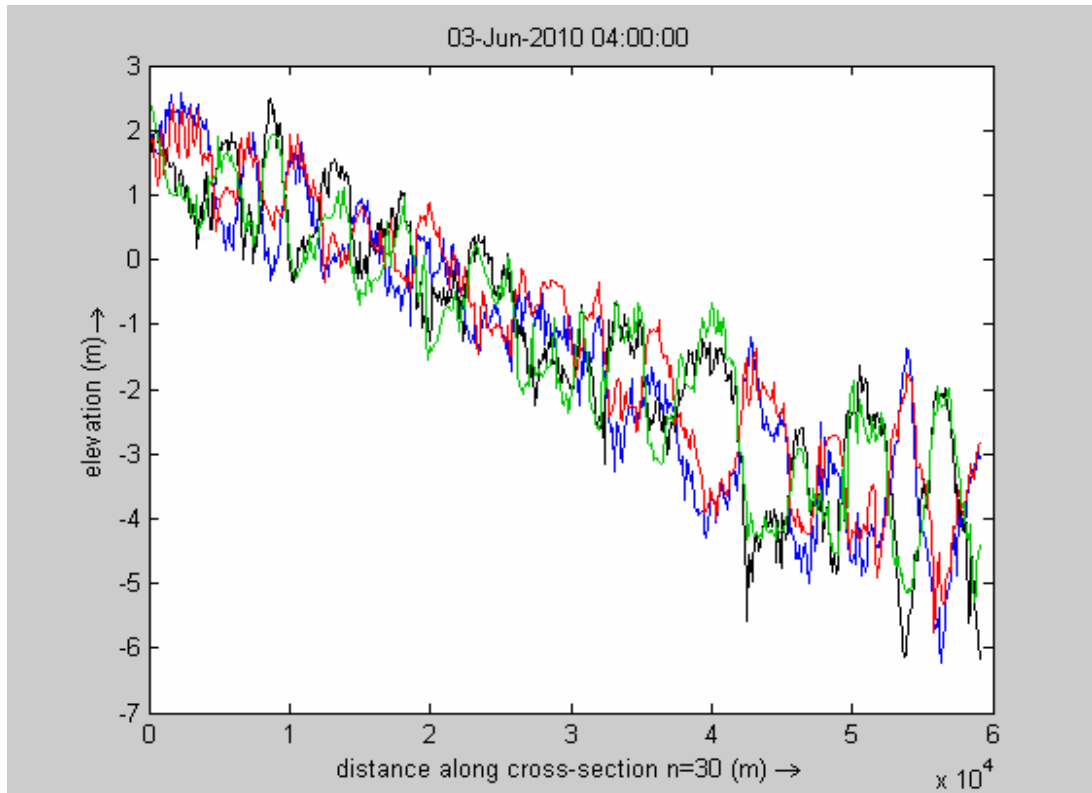
Figuur 15: Bodemverandering in de referentiesimulatie met standalone Delft3D.



Figuur 16: Detail in de bocht bij Tiel (aansluiting Amsterdam-Rijn kanaal).



Figuur 17: Detail in de bocht bij stuw St. Andries.



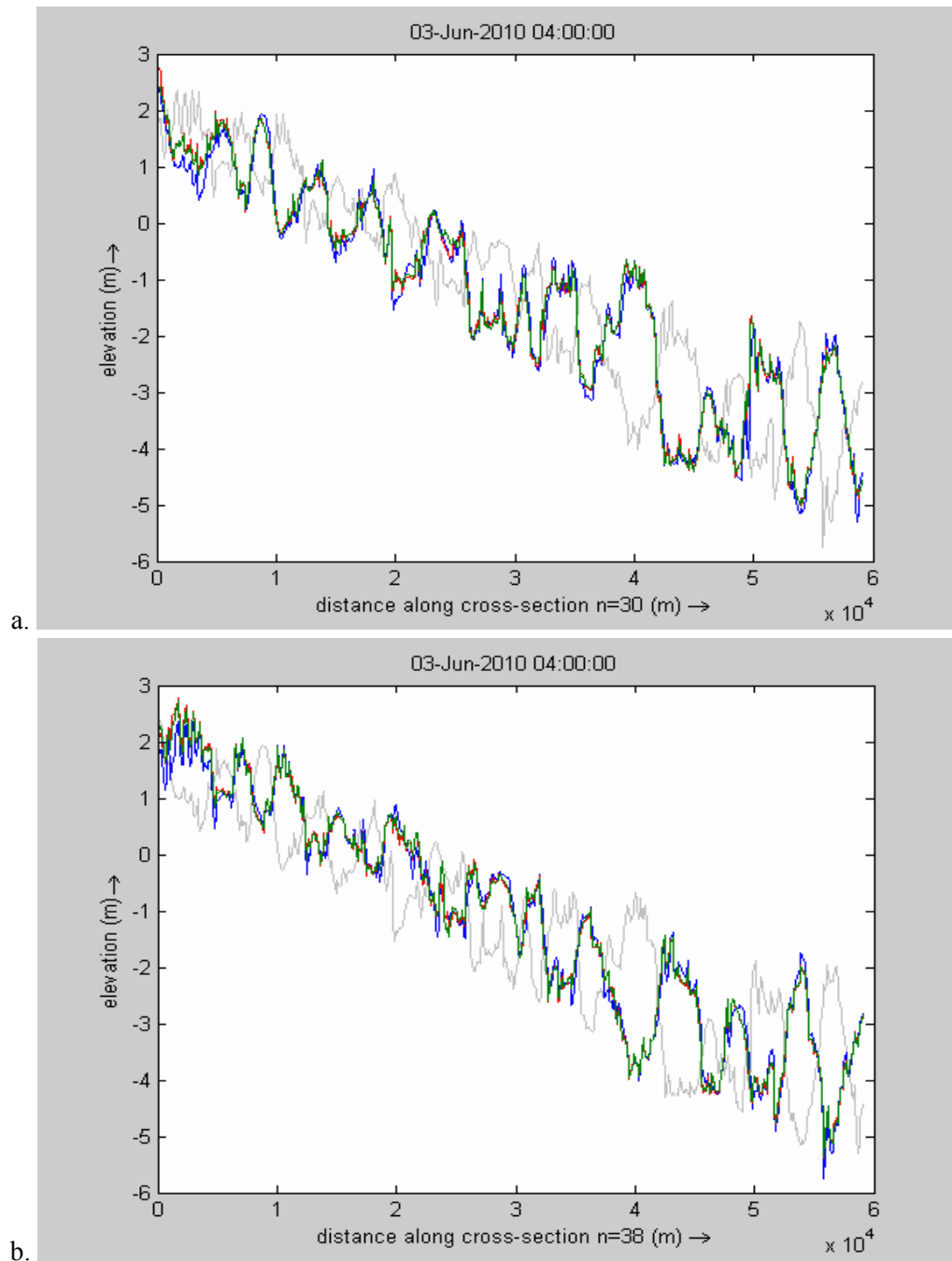
Figuur 18: Bodemligging bij de linker- en rechteroever in de referentiesimulatie met standalone Delft3D. De rode lijn toont het eindresultaat langs de linker (zuid) oever (roosterlijn 38) en dient vergeleken te worden met de blauwe lijn die het beginconditie langs dezelfde roosterlijn toont. Evenzo geeft de groene lijn het eindresultaat en zwart de beginconditie langs de rechter (noord) oever aan (roosterlijn 30).

Omdat de formuleringen in de online morfologie module niet volledig overeenkomen met de formuleringen in het oorspronkelijke Delft3D-MOR model en omdat er gerekend is met een constante afvoer, mag er niet teveel waarde gehecht worden aan de resultaten. In grote lijnen lijken de resultaten wel realistisch; het bankenpatroon is aan het eind van de simulatie vrijwel in evenwicht en komt ondanks de beperkingen redelijk goed overeen met het initiële, gemeten bankenpatroon. Ter plaatse van de vaste (ofwel niet-erodeerbare) laag in de bocht bij St. Andries zijn de transporten nog niet helemaal volgens verwachting (in Delft3D-MOR ging het sedimenttransport op het benedenstroomse deel van de vaste laag altijd naar 0 omdat daar geen sediment lag; in de Delft3D-FLOW met online morfologie simulatie wordt voldoende sediment van bovenstrooms aangevoerd om het sediment transport over vrijwel de gehele vaste laag in stand te houden). Dit is een verschil tussen Delft3D-MOR en Delft3D-FLOW met online morfologie dat nadere analyse verdient, maar het is niet van invloed op het resultaat van deze studie omdat alle simulaties dezelfde morfologie implementatie gebruiken.

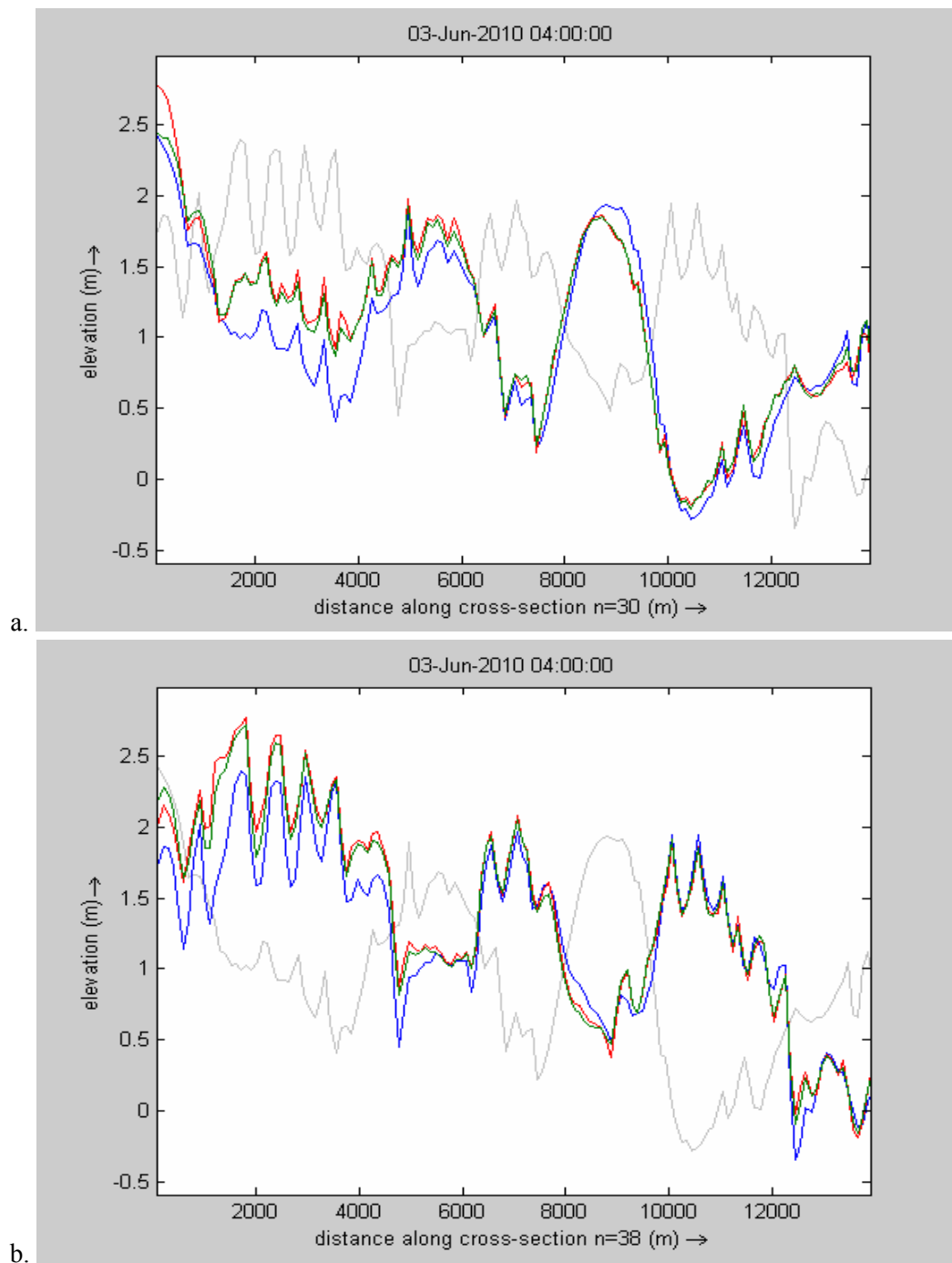
5.3 Gekoppelde simulatie WAQUA/TRIWAQ – Delft3D

De resultaten van een morfologische simulatie met WAQUA en TRIWAQ (1-laags) gekoppeld met Delft3D-FLOW online morfologie komen op hoofdlijnen zeer goed overeen met de resultaten van standalone Delft3D-FLOW. Figuur 19 toont hetzelfde langsverhang als in Figuur 18, maar nu met het eindresultaat van de simulatie gekoppelde simulaties en de

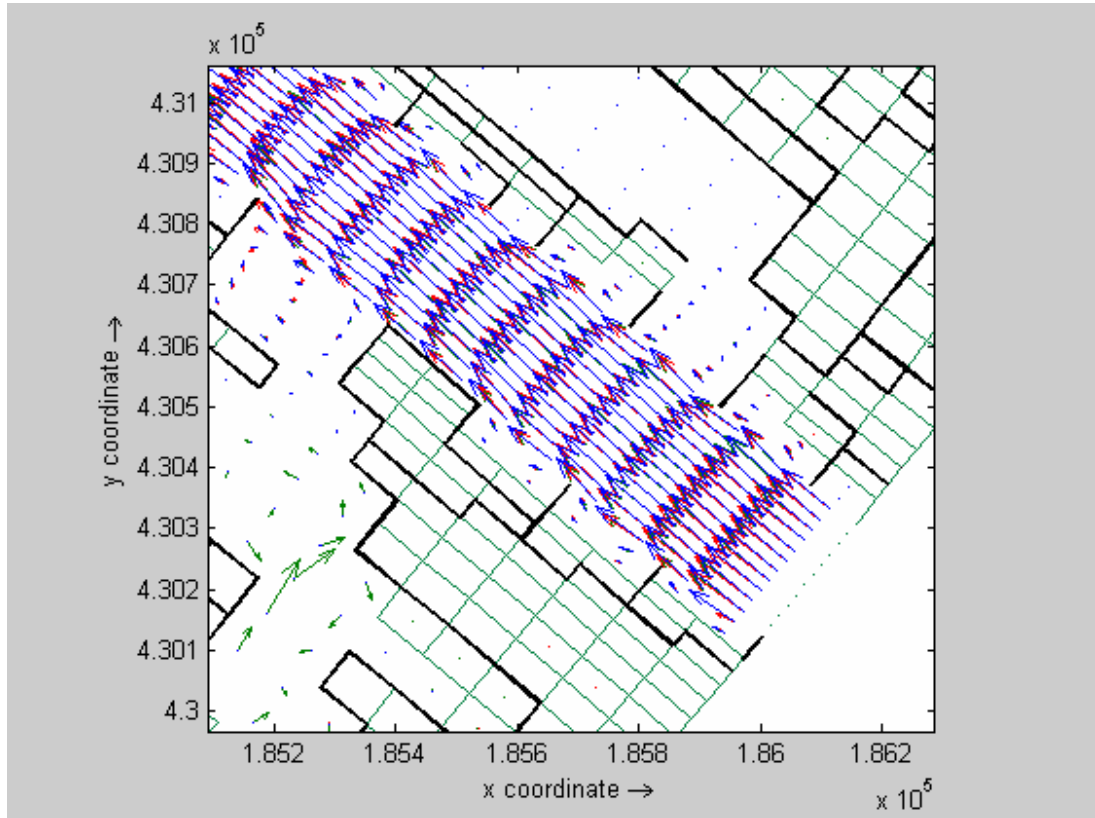
Delft3D referentiesimulatie. De resultaten komen zeer goed overeen; alleen in de eerste vijf kilometer treden significante verschillen op tussen WAQUA/TRIWAQ enerzijds en Delft3D anderzijds (zie Figuur 20 voor een uitvergroting van dat deel van de grafiek). Deze zijn uiteindelijk te wijten aan een iets andere randafhandeling hetgeen onderbouwd wordt door Figuur 21: de grootste verschillen in het stroombeeld treden op de instroomrand bij de linker oever op waar een overlaat op de open rand ligt. De iets andere stroomsnelheden op de instroomrand leiden tot iets andere instroom van sediment. Tenslotte toont Figuur 22 een voorbeeld van de bodemligging langs een dwarsraai ter hoogte van kmr 918 (Zennewijnen).



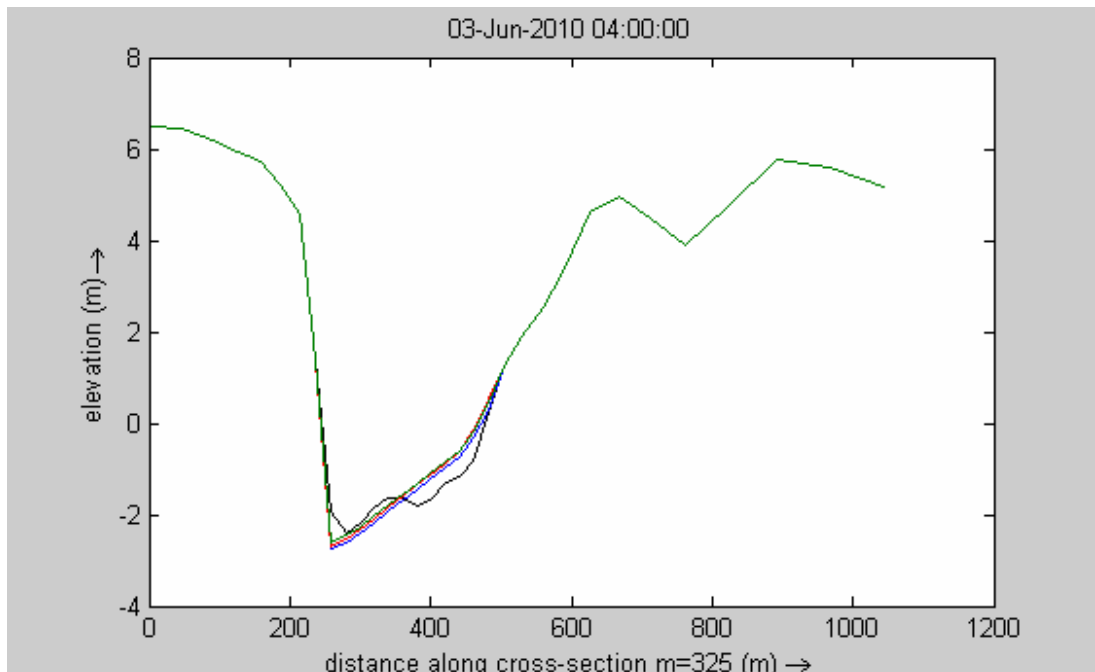
Figuur 19: Bodemligging bij de rechter- (a) en linkeroever (b) aan het eind van de gekoppelde simulaties gebruik makend van WAQUA (rode lijn), TRIWAQ (groene lijn). Ter vergelijking is ook het eindresultaat van de standalone Delft3D-FLOW simulatie langs dezelfde oever (blauwe lijn) en andere oever (grijze lijn) weergegeven.



Figuur 20: Detail van de bodemligging langs de rechter- (a) en linkeroever (b) in de eerste 14 km aan het eind van de gekoppelde simulaties gebruik makend van WAQUA (rode lijn), TRIWAQ (groene lijn). Ter vergelijking is ook het eindresultaat van de standalone Delft3D-FLOW simulatie langs dezelfde oever (blauwe lijn) en andere oever (grijze lijn) weergegeven.



Figuur 21: Detail van het stroombeeld bij de instroomrand. Ten gevolge van een andere afhandeling van een overlaat op de instroomrand wijken de resultaten van de twee modelsystemen van elkaar af. De figuur toont in de snelheidsvectoren voor Delft3D (blauw), WAQUA (rood) en TRIWAQ (groen). De stroming in de linker uiterwaard wijkt in de TRIWAQ berekening af van de andere twee modellen.



Figuur 22: Voorbeeld van een dwarsdoorsnede bij kmr 918 (Zennewijnen) ergens halverwege het model. Alle drie de modellen geven vergelijkbare resultaten.

5.4 Conclusies

Op basis van deze Waal testcase kunnen we de volgende conclusies trekken:

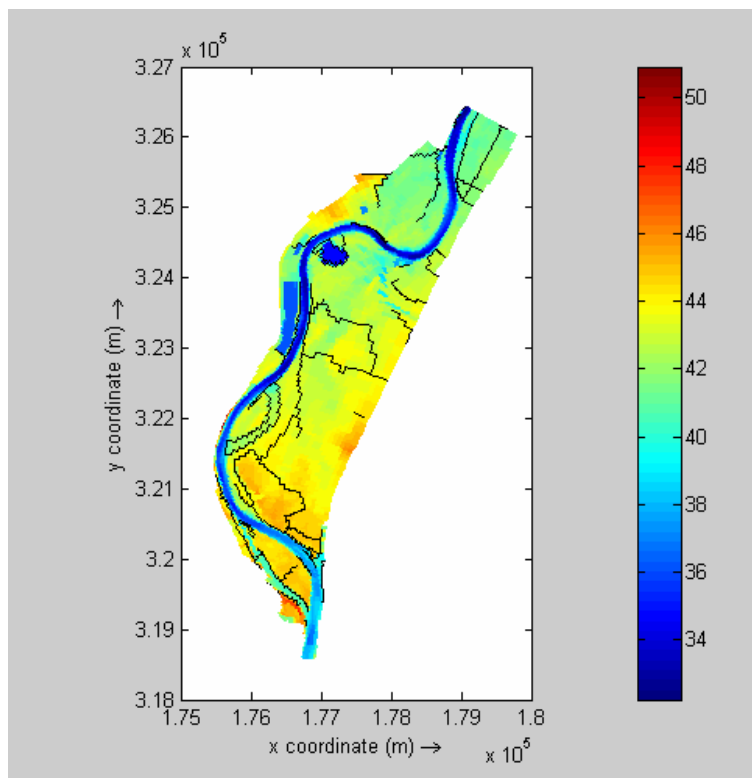
- De huidige testcase voor de Waal betreft het eerste gebruik van de online morfologie-module van Delft3D-FLOW voor een riviermodel met een dergelijke grote schaal. Deze case heeft aangetoond dat er met deze morfologie module voor langjarige simulaties realistische, stabiele resultaten verkregen kunnen worden.
- Het sediment transport met de online morfologie module over vaste lagen wijkt af van eerdere resultaten met Delft3D-MOR en verdient derhalve nog nadere aandacht.
- De koppeling van Delft3D-FLOW online morfologie module met WAQUA en TRIWAQ werkt ook voor praktijkmodellen inclusief alle gebruikelijke overlaten, ruwheidsformuleringen en randvoorwaarden.
- WAQUA en TRIWAQ gaan anders om met overlaten op een instroomrand met automatische debietverdeling dan Delft3D-FLOW. Dit leidt tot wat verschillen in de resultaten.
- De oscillaties die zich voordeden in de met WAQUA gekoppelde berekening in de eerste testcase zijn niet geobserveerd in de huidige testcase van de Waal.
- De koppeling werkt ook voor grote modellen; er zijn dus geen geheugenproblemen.
- Het effect van spiraalstroming inclusief relaxatie effect wordt door Delft3D-FLOW uitgerekend op basis van het stroombeeld aangeleverd door WAQUA/TRIWAQ. Dit levert geen complicaties op.
- Omdat zwevend sediment op vergelijkbare wijze in de code wordt afgehandeld als de spiraalstroming (ook brontermen en de advection-diffusiesolver) kan bovenstaande ook opgevat worden als een eerste positieve stap in de richting van het modelleren van zwevend sediment in gekoppelde simulaties.

Over het onderlopen en droogvallen van uiterwaarden zegt deze testcase nog weinig omdat de simulatie is uitgevoerd bij een constante afvoer. In het algemeen wordt voor langjarige morfologische simulaties een aaneenschakeling van constante afvoeren gebruikt (een geschematiseerde afvoerhydrograaf met quasi-stationaire aanpak) waardoor een hoge mate van rekenaars-efficiëntie bereikt kan worden. Omdat deze aanpak nog niet beschikbaar is voor Delft3D-FLOW met online morfologie module en omdat deze aanpak lastig te realiseren is voor het gekoppelde systeem, is een dergelijke simulatie niet uitgevoerd. De laatste testcase (Maas model) simuleert de morfologische ontwikkeling tijdens een korte hoogwatergolf die dynamisch wordt doorgerekend.

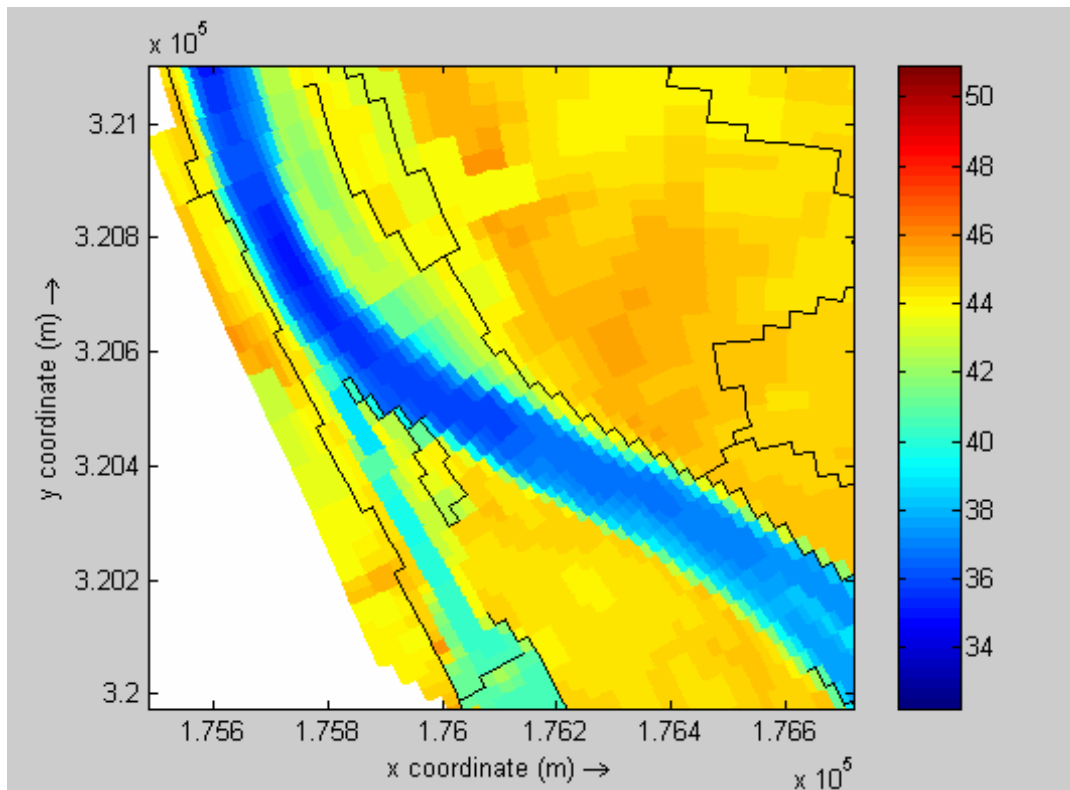
6 Maas model

6.1 Inleiding

Als tweede praktijkmodel gebruiken we het zogenaamde “maasdemo” model dat in SIMONA kader vaker gebruikt wordt als testmodel. Dit is een model van ongeveer 10 km lang stuk van de Grensmaas. Het model begint ongeveer 1.5 km bovenstrooms van de stuw bij Borgharen en omvat de uiterwaarden bij Itteren en Borgharen. De stuw zelf zit niet in het model omdat zowel Delft3D als TRIWAQ problemen hebben met de schematisatie van de stuw als barri er (Delft3D ondersteunt momenteel nog geen barri ers met sturing op waterstanden, TRIWAQ ondersteunt nog niet het volledige regime aan afvoerrelaties). In tegenstelling tot het Waal model is dit gebied nog nooit eerder in een 2D morfologisch model gevat. Vanuit eerdere studies is wel bekend dat het gebied gekenmerkt wordt door een brede gradatie aan sediment en dus eigenlijk gemodelleerd zou moeten worden met gegradeerd sediment. Het voert echter te ver buiten de doelstellingen van dit project om een dergelijk model op te zetten. Daarom wordt in dit project het sediment geschematiseerd als uniform sediment met een D_{50} van 1.5 cm en een D_{90} van 2.5 cm. Voor dit gebied rekenen we  en hoogwater door. De hoogwatergolf duurt 2.5 dag en wordt doorgerekend met een tijdstap van 0.25 minuut. De gebruikte viscositeit is gelijk aan $0.5 \text{ m}^2/\text{s}$. Figuur 23 en 24 tonen het model waarbij de laatste figuur meer specifiek een stuk van het model met trapjeslijnen langs het zomerbed toont, hetgeen niet optimaal is voor morfologische berekeningen (in het bijzonder tijdens laagwater).



Figuur 23: Het hele modelgebied van de Grensmaas.

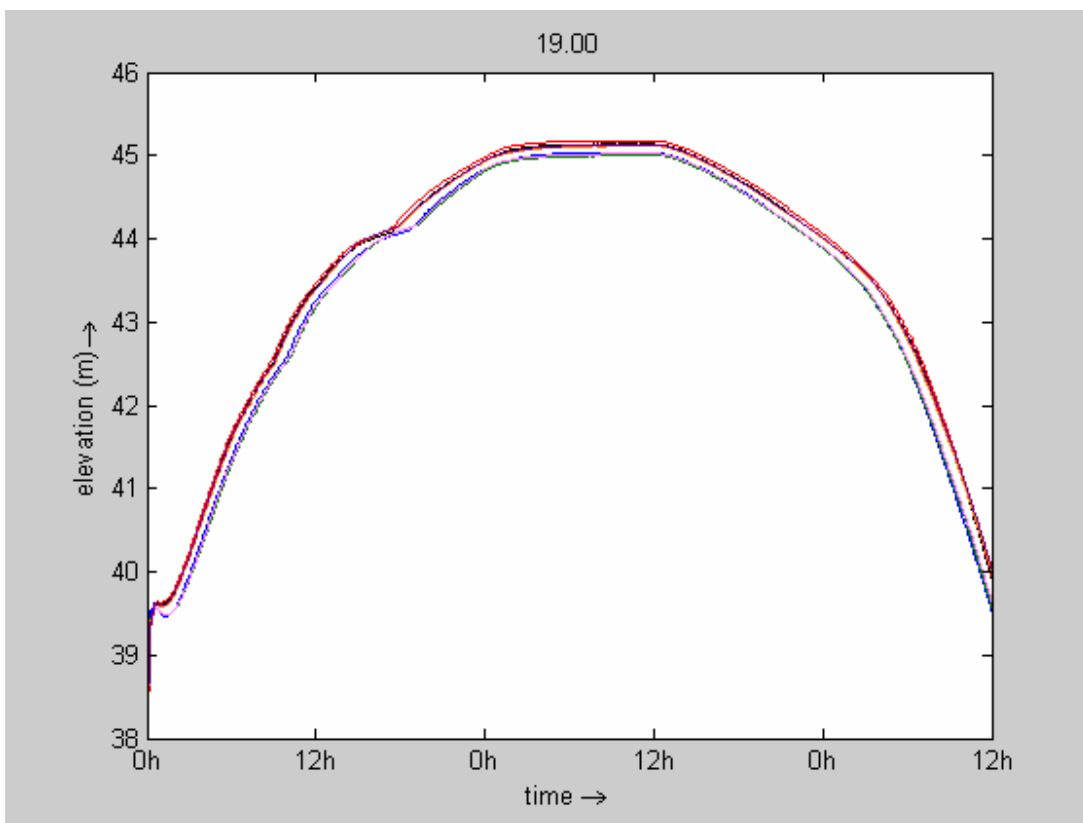


Figuur 24: Detail van modelgebied vlak benedenstrooms van stuw Borgharen (niet in model) met trapjeslijnen langs zomerbed.

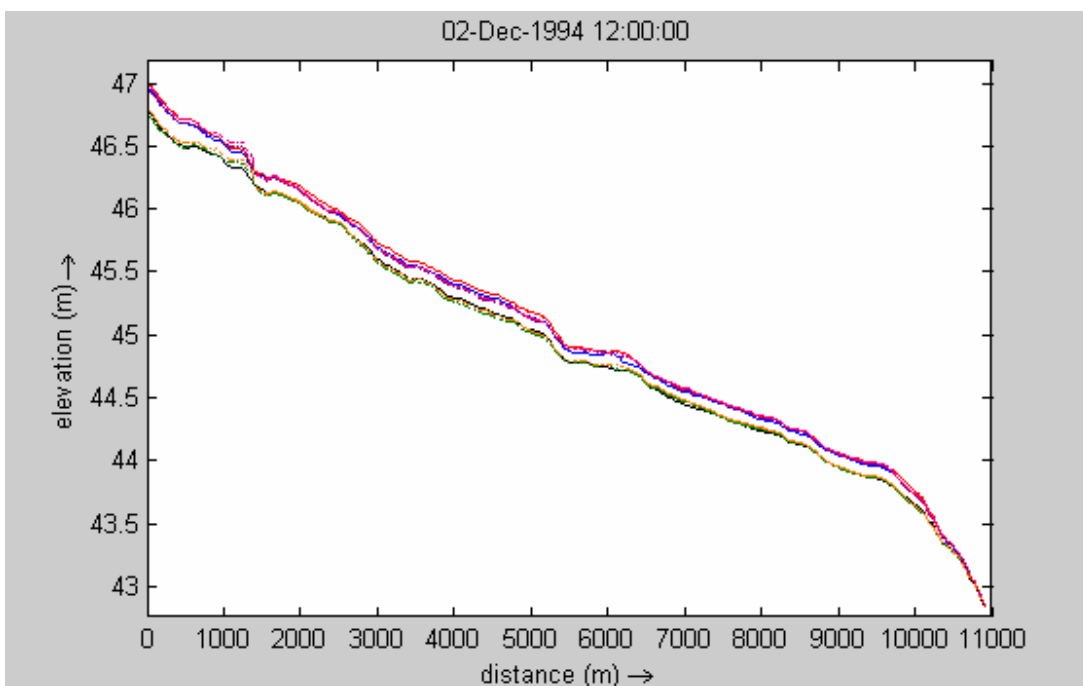
6.2 Hydrodynamische simulaties

De geschematiseerde hoogwatergolf bestaat uit een periode van 24 uur waarin de afvoer lineair toeneemt van 250 tot 3000 m³/s waarna 12 uur lang het debiet constant blijft en vervolgens weer terugzakt naar 250 m³/s gedurende een periode van 24 uur. Op de benedenstroomse rand is een QH relatie voorgeschreven.

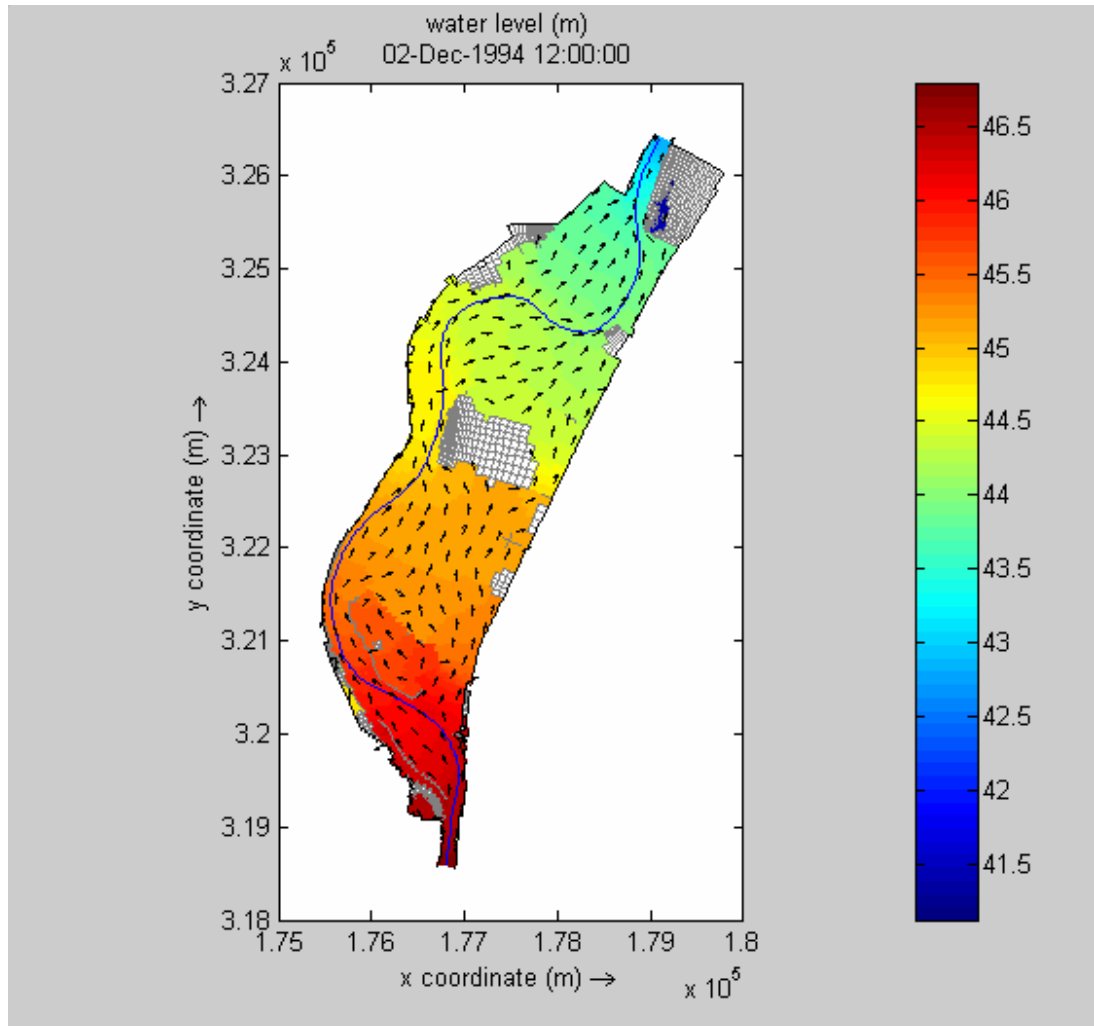
Voor de morfologische simulatie hebben we de eis dat de bodemligging in de snelheidspunten wordt bepaald op basis van de bodemligging in de waterstandspunten. Op dit moment is de enige mogelijkheid het gebruik van de MIN_DPS optie voor de bodemligging in de snelheidspunten. Omdat het gangbare maasdemo model gebruik maakt van de MEAN_DPD optie om de bodemligging in de snelheidspunten uit te rekenen uit de diepte in de hoekpunten, moest deze instelling veranderd worden. Om het effect van deze verandering te bepalen zijn berekeningen uitgevoerd met Delft3D-FLOW, WAQUA en TRIWAQ met zowel de MEAN_DPD als de MIN_DPS optie. Figuur 25 toont de resultaten van deze simulaties; we zien dat deze overgang leidt tot een verhoging van de waterstanden: de bodem in de snelheidspunten ligt bij het gebruik van MIN_DPS gemiddeld hoger dan bij het gebruik van MEAN_DPD. Tijdens het hoogwater fluctueert het stroombeeld ter plaatse van kmr 20 in de simulaties met WAQUA en Delft3D-FLOW; de TRIWAQ simulatie vertoont deze fluctuaties niet of nauwelijks. Figuur 26 toont het waterstandsverloop langs de rivier-as, welke zelf ruimtelijk wordt weergegeven in Figuur 27. Het ontbreken van diagonale overlaten in de Delft3D schematisatie levert geen significante verschillen op.



Figuur 25: Waterstandsverloop tijdens meerdere Delft3D, WAQUA en TRIWAQ simulaties op locatie Rkm 19 (halvewege het model). De verschillen tussen de verschillende modelsystemen zijn relatief klein t.o.v. het verschil tussen de simulaties met de MIN_DPS optie (bovenste band van lijnen) en die met de MEAN_DPD optie (onderste band van lijnen).



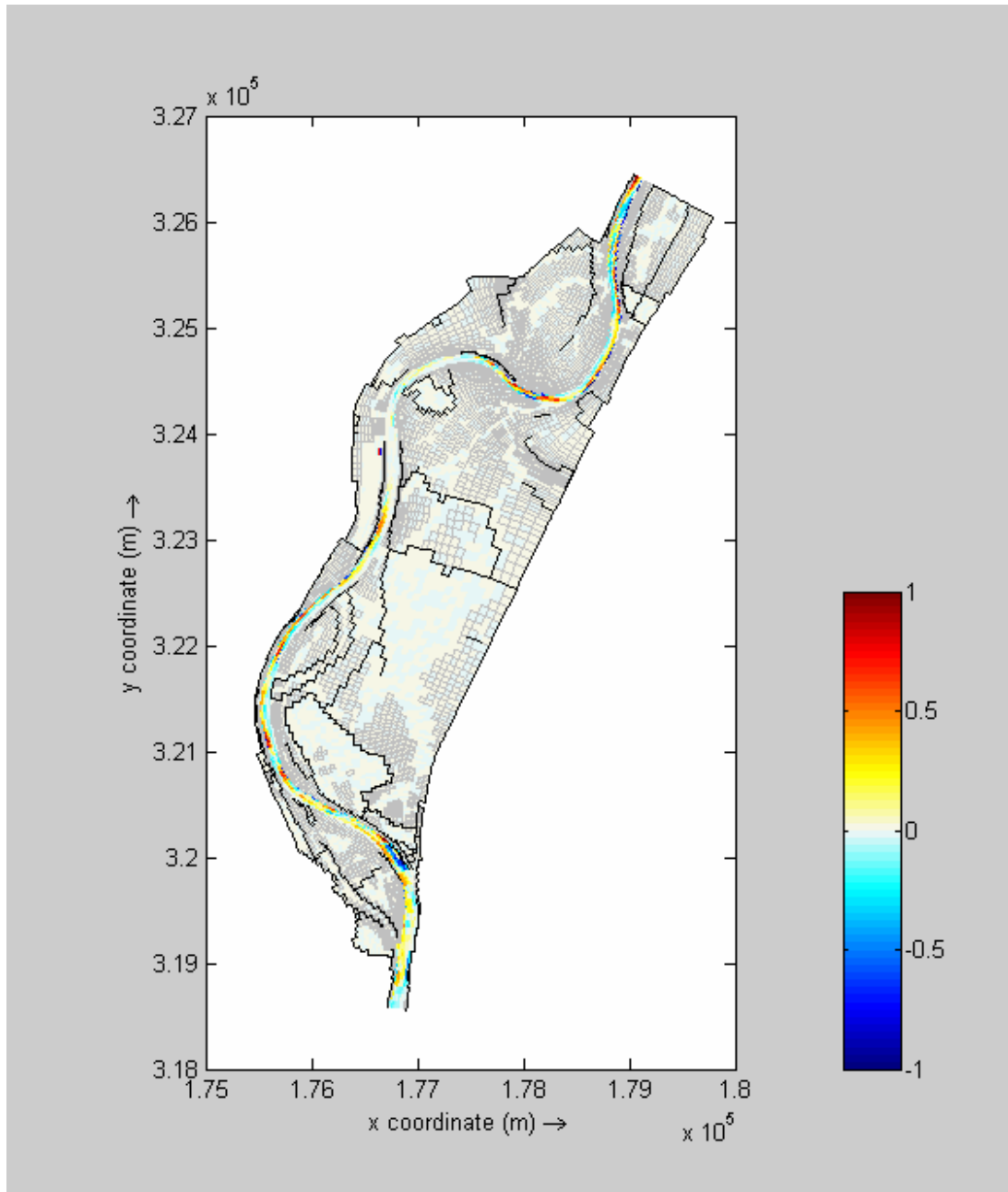
Figuur 26: Waterstandsverloop langs de rivier-as voor meerdere Delft3D, WAQUA en TRIWAQ simulaties tijdens de piek van de afvoergolf. De verschillen tussen de modelsystemen zijn relatief klein t.o.v. het verschil tussen de simulaties met de MIN_DPS optie (bovenste band van lijnen) en die met de MEAN_DPD optie (onderste band van lijnen).



Figuur 27: Waterstand, genormaliseerd snelheidsbeeld ten tijde van de piek van het hoogwater. De blauwe lijn toont de rivier-as waarlangs het waterstandsverloop is geplot in figuur 26.

6.3 Morfologische simulaties

Voor de morfologische simulatie hebben we de standaard transportformule van Meyer-Peter en Müller gebruikt; daarin zit een kritische schuifspanning waarmee het gedrag van grof sediment globaal beschreven kan worden. In een deel van het model (rond Rkm 20 en 21) blijft de stroomsnelheid tijdens vrijwel de gehele hoogwatergolf te laag voor sedimenttransport. De Figuren 28, 29 en 30 tonen de resultaten van respectievelijk de standalone Delft3D-FLOW simulatie, de met WAQUA gekoppelde simulatie en de met TRIWAQ gekoppelde simulatie. Het grootschalige patroon van erosie en sedimentatie is vrijwel gelijk voor alle drie simulaties. In de op een na laatste bocht van het model zien we vrijwel geen veranderingen, dat is het gebied waar vrijwel geen transport optreedt. Ter plaatse van de stuw Borgharen treedt significante erosie op hetgeen waarschijnlijk mede veroorzaakt wordt doordat de stuw niet in het model zit. De getoonde resultaten voor TRIWAQ zijn bepaald met een tijdstap van 0.1 minuut. Bij gebruik van 0.25 minuut bleken er instabiliteiten op te treden in de impulsvergelijking rond het onderlopen van delen van de uiterwaarden.



Figuur 28: Morfologische ontwikkeling tijdens de hoogwatergolf van 2.5 dag volgens standalone Delft3D-FLOW (erosie/sedimentatie in m).

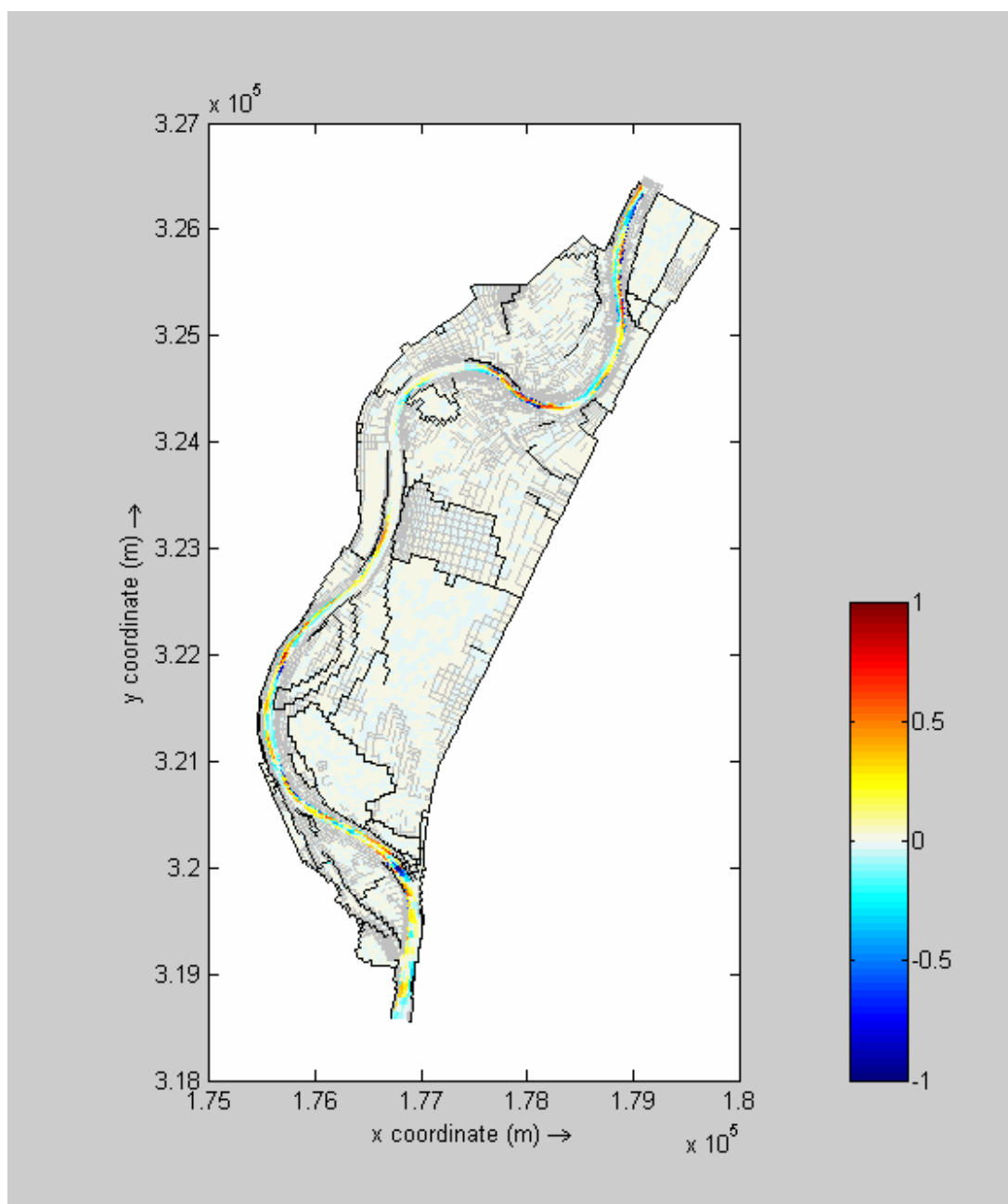
Figuur 31 toont ten slotte het verschil tussen de berekende waterstanden nabij de bovenrand van het model tijdens een simulatie met morfologische ontwikkeling en een simulatie zonder morfologische ontwikkeling. Hoewel het morfologisch model nog niet gekalibreerd is en er dus niet veel waarde gehecht mag worden aan de berekende waarden, is het wel een interessante maatstaf om de resultaten te vergelijken. We merken op dat hoewel de algehele trend wel hetzelfde is in alle drie gevallen, er toch ook aanzienlijke verschillen zijn. Met name aan het begin van de simulatie treden er bij WAQUA en TRIWAQ aanzienlijke veranderingen in de waterstand op. De veranderingen in Delft3D-FLOW standalone gaan veel geleidelijker en veel eenduidiger dan de veranderingen in de andere twee gevallen. Het achterhalen van de oorzaak van de verschillen vergt een gedetailleerde analyse van de (vele)

verschillen in de implementaties tussen de modellen. Deze analyse voert echter te ver voor deze studie.

6.4 Conclusies

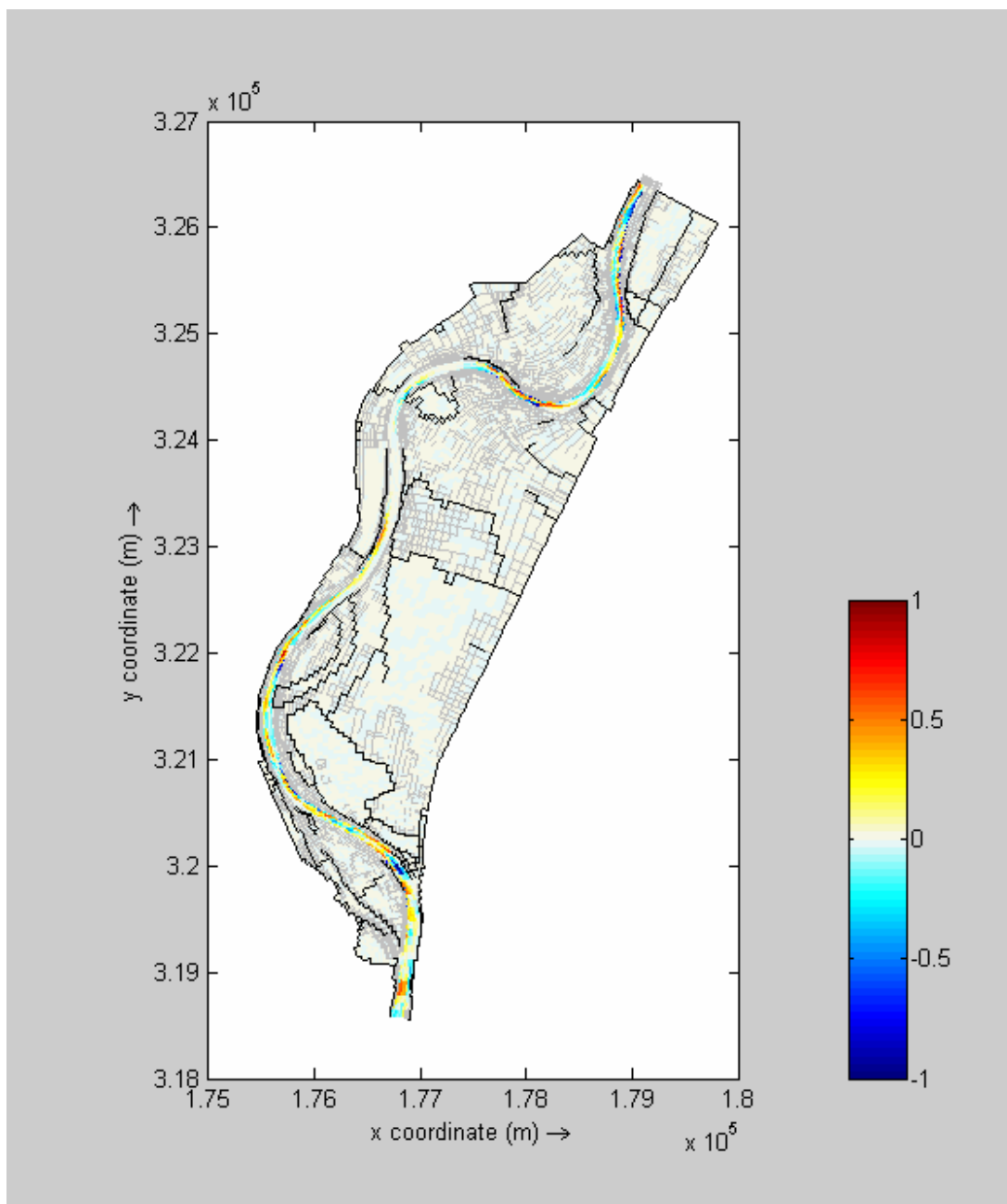
Op basis van de hoogwatersimulaties voor de Maas kunnen we het volgende concluderen:

- De gekoppelde berekening gaat goed in combinatie met droogvallen.
- De grootschalige erosie en sedimentatie patronen van alle drie de morfologische berekeningen lijken sterk op elkaar.



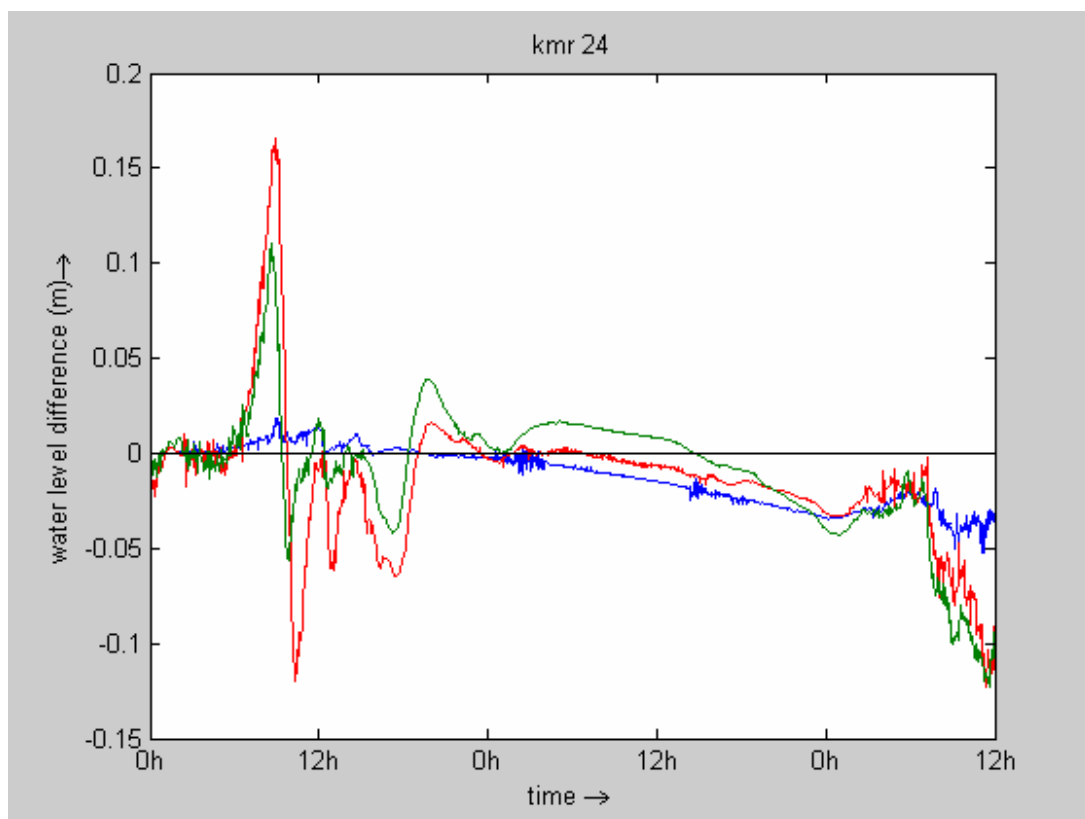
Figuur 29: Morfologische ontwikkeling tijdens de hoogwatergolf van 2.5 dag volgens WAQUA gekoppeld met Delft3D-FLOW online morfologie module (erosie/sedimentatie in m).

- Het trapjeslijn effect op de morfologie lijkt mee te vallen, maar de simulatie wordt gedomineerd door een hoogwatergolf waarbij de stroming het zomerbed toch veel minder volgt.
- Het veranderen van de droogvaloptie veroorzaakt een groter verschil in de waterstanden dan het overschakelen van WAQUA op TRIWAQ of Delft3D-FLOW. Het veranderen van de optie om de bodemligging in de snelheidspunten te bepalen van MEAN_DPD in MIN_DPS veroorzaakt een 20 cm hogere waterstand bij de bovenrand (model is slechts 10 km lang).



Figuur 30: Morfologische ontwikkeling tijdens de hoogwatergolf van 2.5 dag volgens TRIWAQ (1-laags) gekoppeld met Delft3D-FLOW online morfologie module (erosie/sedimentatie in m).

- Het effect van de morfologische ontwikkeling op de berekende hoogwaterstanden vertoont voor alle drie de simulaties dezelfde trend, maar de resultaten lopen op bepaalde momenten nog aanzienlijk uit elkaar. Omdat het model niet gecalibreerd is, mag aan de absolute waarde van de getoonde resultaten niet veel waarde gehecht worden.
- Ook bij deze toepassing hebben we geen duidelijke problemen ondervonden van de afwijkende discretisatie van WAQUA. In dit geval hadden we de meeste problemen om de met TRIWAQ gekoppelde simulatie aan de praat te krijgen. Dit is uiteindelijk wel vrij snel gelukt.



Figuur 31: Verschil in de berekende waterstanden nabij de bovenstroomse rand: simulatie met morfologische ontwikkeling ten opzichte van simulatie zonder morfologische ontwikkeling. De verschillende lijnen representeren de simulaties: Delft3D standalone (blauw), WAQUA gekoppeld (rood), TRIWAQ gekoppeld (groen). Omdat het model niet gecalibreerd is, mag aan de absolute waarde van de getoonde resultaten niet veel waarde gehecht worden.

7 Conclusies en aanbevelingen

7.1 Conclusies

In dit rapport wordt verslag gedaan van een project waarin WL | Delft Hydraulics met assistentie van VORtech Computing een prototype-koppeling van WAQUA met de online sedimenttransport en morfologiemodule van Delft3D-FLOW heeft gerealiseerd. Het doel van dit project was het evalueren van de geschiktheid en openheid van de OMS backbone voor het tot stand brengen van dit soort koppelingen. Hiervoor zijn een functioneel en technisch ontwerp gemaakt, en is de beoogde koppeling geïmplementeerd en voor verschillende schematische en realistische testcases gevalideerd.

Doordat de proefkoppeling zodanig is opgezet dat zoveel mogelijk onderdelen van de afzonderlijke modelsystemen intact zou blijven, is het aantal complicaties beperkt gebleven. De gerealiseerde proefkoppeling van WAQUA en TRIWAQ (met één laag) met Delft3D-FLOW online morfologie module toont aan dat de OMS backbone op deze wijze succesvol kan worden ingezet voor dit soort koppelingen.

Bij de uitvoering van het project zijn de volgende informatica-technische leerpunten ten aanzien van de OMS backbone naar voren gekomen:

- Bij het gebruik van meerdere werkdirectories voor verschillende programma's die communiceren via de OMS backbone dienen de exchange en link configuratie bestanden in alle betreffende werkdirectories te staan.
- In de OMS backbone ontbreekt een synchronisatie mechanisme om buffer-overflow te voorkomen tijdens een simulatie met een eenzijdige communicatie.
- OMS aggregaten die van de backbone opgevraagd worden, moeten "gedestroyed" worden om te voorkomen dat het geheugen volloopt (anders blijven alle aggregaten bewaard).

In het algemeen kan echter worden gesteld dat de OMS backbone goed voldoet voor de hier gerealiseerde één op één koppeling. De via de backbone gecommuniceerde primaire grootheden zijn nu ook op het uitvoerbestand van Delft3D-FLOW beschikbaar. Tevens is hierdoor echter ook de mogelijkheid geschapen om de gekoppelde WAQUA berekening via Delft3D-FLOW online te visualiseren (tenminste met betrekking tot de primaire grootheden).

Analyse van de eerste 'simpele' testcase wees op de mogelijkheid van problemen met het afwijkende numerieke schema van WAQUA. Dit heeft bij de praktijk testcases echter niet voor problemen gezorgd. In het algemeen kunnen we stellen dat de resultaten van de gekoppelde Delft3D-FLOW – WAQUA/TRIWAQ simulaties goed overeen komen met de Delft3D-FLOW standalone resultaten.

Recente aanpassingen aan het WAQUA systeem (aanpassing van de droogvalopties) en Baseline (toelevering van de bodemligging in de waterstandspunten; koppeling met Delft3D) hebben hierbij ervoor gezorgd dat de modelschematisaties in beide modelsystemen op dezelfde numerieke basisregels gebaseerd konden worden waardoor de numerieke aanpak grotendeels consistent gemaakt konden worden. Desondanks blijven er detailverschillen tussen de numerieke implementaties van de modellen welke uiteindelijk leiden tot enigszins verschillende resultaten en ook de numerieke stabiliteit is onder bepaalde omstandigheden niet helemaal optimaal.

7.2 Aanbevelingen

Op basis van deze studie komen we met de volgende aanbevelingen voor vervolgactiviteiten:

- Binnen het project zijn we er uiteindelijk in geslaagd om een goed werkende koppeling tussen Delft3D-FLOW en WAQUA (of 1-laags TRIWAQ) te realiseren ten behoeve van morfologische simulaties. Daarbij hebben we gebruik gemaakt van de OMS backbone. Het gebruik van de OMS backbone is uiteindelijk redelijk eenvoudig. De documentie, voorbeelden en foutmeldingen zijn echter nog wel duidelijk voor verbetering vatbaar; dit zal in het algemeen het oplossen van uiteindelijk vaak simpele problemen aanzienlijk kunnen versnellen.
- Binnen de huidige studie is vooral gelet op de correcte afhandeling van de fysische processen in het gekoppelde systeem. Hoewel er geen significante toename in de rekentijd is geconstateerd, hebben we binnen het project nog niet expliciet naar de performance van het gekoppelde systeem gekeken. Dergelijke performance testen zouden nog uitgevoerd moeten worden.
- De huidige OMS backbone ondersteunt nog geen data-uitwisseling tussen modellen die parallel berekend worden. Daarom werkt het gekoppelde systeem alleen voor simulaties voor één domein zonder parallel rekenen. Merk op dat de morfologische processen in Delft3D-FLOW gelijk met de waterbeweging over de verschillende deeldomeinen/processoren worden verdeeld en daarom ondersteund dat systeem zelf wel de combinatie van morfologie en meerdere domeinen. Het is gewenst dat de OMS backbone wordt uitgebreid met ondersteuning voor dergelijke simulatieomstandigheden.
- De huidige koppeling is getest voor rivierentoeappingsen met bodem- en totaaltransportformules voor 2D simulaties. Zwevend transport en 3D simulaties zijn nog buiten beschouwing gebleven. Er zouden testen uitgevoerd kunnen worden met 2D zwevend sediment simulaties. Voor 3D simulaties is nog een extra ontwikkelinspanning nodig; daarbij verdient de wijze waarop de lagen in de vertikaal verdeeld worden de nodige aandacht. Ook de daarop volgende stap van terugkoppeling van dichtheidseffecten op de stroming in 3D (of van spiraalstroming op het 2D stroombeeld van WAQUA) dient nog gerealiseerd te worden. Deze lijst van onderwerpen kan worden uitgebreid met het effect van golven op stroming en sedimenttransport en kusterosie.
- De simulaties hebben aangetoond dat de verschillen in de waterbeweging berekend door de verschillende pakketten in het algemeen klein zijn ten opzichte van de verschillen bij verandering van de numerieke parameters (zoals de droogvaloptie). De verschillen in numerieke implementatie blijven desondanks tot afwijkingen en soms instabiliteiten leiden. Verdere uniformering tussen de modelsystemen wordt dan ook aanbevolen.

Op basis van de gerealiseerde koppeling kunnen er verschillende vervolgactiviteiten worden bedacht. Wij vinden het belangrijk dat de keuzes die hierin worden gemaakt in een visie voor de langere termijn zijn ingebed. Hiervoor is het nodig dat er een lange termijnvisie komt voor de numerieke modellering van open watersystemen in Nederland, die algemeen gedragen wordt.

Literatuur

- Engelund, F., Hansen, E., 1967. *A Monograph On Sediment Transport in Alluvial Streams*. Teknisk Forlag, Copenhagen, Denmark.
- Meyer-Peter, E., Müller, R., 1948. "Formulas for bed-load transport." In Proc., 2nd Meeting IAHR, Stockholm, Sweden, 39-64.
- Rijkswaterstaat, 2005. *User's Guide, WAQPRE, version 10.38*.
- Rijkswaterstaat, 2005. *User's Guide, WAQPRO, version 10.38*.
- Struiksmā, N.; Olesen, K.W.; Flokstra, C.; Vriend, H.J. de, 1985. "Bed deformation in curved alluvial channels", *Journal of Hydraulic Research*, IAHR, Vol.23, No.1, pp.57-79.
- VORtech, 2004. *Detailontwerp verbetering droogvallen en onderlopen in WAQUA/TRIWAQ*, technisch rapport, TR04-02, studie t.b.v. RIKZ-1407.
- WL | Delft Hydraulics 2004. *2D bodemverandering in vaarweg*, rapport Q3811, studie t.b.v. RIZA.
- WL | Delft Hydraulics 2005. *Morfologische effecten van achterloopse kribben*, rapport Q3811.10, studie t.b.v. RIZA.
- WL | Delft Hydraulics 2005. *Morfologische effecten uiterwaardmaatregelen Heesselt*, rapport Q4039.10, studie t.b.v. RIZA.
- WL | Delft Hydraulics 2005. *Generic data definition for WL applications*, concept R&D rapport, M3567.10.
- WL | Delft Hydraulics 2005. *Delft3D-FLOW user manual, draft version 3.11*.
- WL | Delft Hydraulics, Rijkswaterstaat, 2005. *Programmer's Guide OMS Backbone, version 1.7*.