

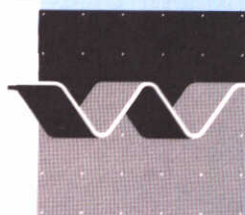
Toetsing numerieke methoden MOZART

Verslag onderzoek

Juli 1994



RIZA Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer
en Afvalwaterbehandeling



	bibliotheek postbus 177 - 2600 MH Delft waterloopakundig laboratorium/WL
BB	68231
WL	T 1348
EXPL	 R0001986

Toetsing numerieke methoden MOZART

M.A.J. Borsboom

P.S. Grashoff

A.A. Markus

G.F. Prinsen

Verslag onderzoek

Juli 1994

Inhoud

1	Inleiding	1 — 1
2	De numerieke methode	2 — 1
2.1	De vergelijkingen voor de onverzadigde zone	2 — 1
2.2	Details van het rekenschema	2 — 3
3	Analyse van de numerieke methode	3 — 1
3.1	Stationair vochtprofiel	3 — 1
3.2	Het effect van brontermen	3 — 3
3.3	Stabiliteit en oscillaties	3 — 6
3.4	Verbeteringen aan het numerieke schema	3 — 9
4	Testen numerieke oplosmethode	4 — 1
4.1	Inleiding	4 — 1
4.2	Overzicht testprogramma	4 — 2
4.3	Constante verdamping	4 — 3
4.4	Variabele neerslag	4 — 5
4.5	Inhomogene bodem en variabele neerslag	4 — 7
4.6	Staring reeks en drainagefuncties	4 — 10
5	Conclusies en aanbevelingen	5 — 1
6	Literatuur	6 — 1
Appendix A	Middelingsprocedure	A — 1
Appendix B	Insteltijd voor diffusieproblemen	B — 1

Appendix C	Resultaten van testset 1	C — 1
Appendix D	Resultaten van testset 2	D — 1
Appendix E	Resultaten van testset 3	E — 1
Appendix F	Resultaten van testset 4	F — 1
Appendix G	De predictor-corrector methode	G — 1
Appendix H	De theta-methode	H — 1

1 Inleiding

De redesign van DEMGEN zal leiden tot de ontwikkeling van het modelsysteem MOZART: model voor de onverzadigde zone voor landelijke analyses en regionale toepassingen. In de definitiestudie MOZART (WL|RIZA, 1993) wordt aanbevolen te onderzoeken welke numerieke en eventueel analytische methoden geschikt zijn voor het bepalen van de stroming in de onverzadigde zone. Dit is slechts één van de aspecten van het model. Uiteindelijk bepaalt het de waterbalans voor een geheel gebied, zowel voor het grondwater als voor het oppervlaktewater. De resultaten worden onder andere gebruikt voor waterkwaliteitsberekeningen.

Op dit moment maakt het model DEMGEN gebruik van een semi-stationaire methode. De semi-stationaire methode werkt met twee segmenten: de wortelzone en de ondergrond. Door een apart programma wordt de evenwichtoplossing voor de ondergrond voor een groot aantal gevallen bepaald en opgeslagen in tabelvorm. DEMGEN maakt gebruik van die oplossingen om de actuele situatie te berekenen. Voor de ondergrond wordt als onderrandvoorwaarde een fluxrandvoorwaarde gebruikt. De bovenrandvoorwaarde voor de ondergrond is de capillaire opstijging op het grensvlak wortelzone-ondergrond; deze wordt iteratief uit de waterbalansen van wortelzone en ondergrond bepaald. Voor de wortelzone is de onderandvoorwaarde de capillaire opstijging, en geldt als bovenrandvoorwaarde de netto som van regenval, verdamping, beregening en surface runoff. In de vergelijking worden variaties in de horizontale richting buiten beschouwing gelaten. De resultaten van wortelzone en ondergrond worden voor waterkwaliteitsberekeningen achteraf omgerekend naar een groter aantal segmenten.

Het bestaan van twee aparte programma's maakt het onderhoud moeilijk (de opzet is immers niet erg flexibel) en er lijkt bovendien geen reden te zijn voor die scheiding. Ook blijkt de semi-stationaire methode niet altijd nauwkeurig genoeg, met name in situaties met hevige regenval. Wel blijft dan de vraag hoe de instationaire vergelijking zo efficiënt en effectief mogelijk kan worden opgelost.

Ten behoeve van de redesign is in een eerder stadium een literatuuronderzoek uitgevoerd naar de oplosmethoden voor deze vergelijking (WL, 1994). Uit deze studie is naar voren gekomen dat analytische methoden te grote beperkingen met zich meebrengen en dat er goede numerieke methoden voorhanden zijn om de vergelijking voor een dynamisch probleem op te lossen. Hiermee kunnen de tekortkomingen van het huidige systeem opgeheven worden.

Wel is gesteld dat de geselecteerde numerieke methode onderzocht moet worden op eigenschappen als nauwkeurigheid en stabiliteit. Immers, wanneer het model MOZART operationeel wordt gebruikt, dan moet het betrouwbaar zijn.

In dit rapport wordt verslag gedaan van de toetsing van de geselecteerde numerieke methoden waarbij verschillende situaties zijn doorgerekend. In eerste instantie is de predictor-corrector methode onderzocht. Omdat de resultaten hiervan tegenvielen is naderhand een iteratieve methode onderzocht. De resultaten van deze iteratieve methode zijn beter. Het rapport gaat daarom met name in op de gebruikte iteratieve methode. Voor de volledigheid wordt de predictor-corrector methode in Appendix G beschreven.

Tevens is getracht aan te geven welke aspecten in de praktijk aandacht behoeven, namelijk

de keuze van randvoorwaarden en schematisering. Daartoe wordt eerst het fysisch-wiskundige probleem geschetst met in detail de numerieke methode (hoofdstuk 2) en dan volgt een beknopte analyse van de methode in relatie tot de praktische problemen waarvoor het model dient te worden gebruikt (hoofdstuk 3). Hoofdstuk 4 beschrijft de resultaten van de toetsing zelf op de toetsgevallen. Het laatste hoofdstuk bevat de conclusies en de aanbevelingen.

2 De numerieke methode

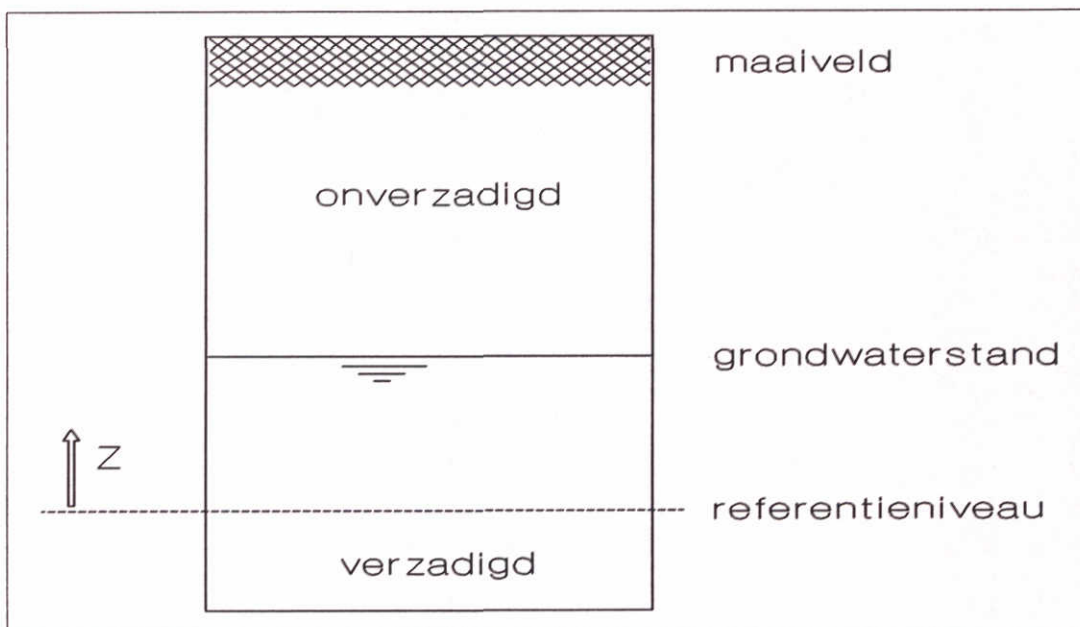
2.1 De vergelijkingen voor de onverzadigde zone

Het wiskundige probleem kan als volgt geformuleerd worden (Freeze en Cherry, 1979; de notatie volgt die van de voorstudie (WL, 1994); zie Figuur 2.1):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right) + S(h, z) \quad (1)$$

waarin:

- h - drukhoogte (cm)
- K - doorlatendheid (cm/d)
- S - bronterm, over het algemeen een functie van h en z (d⁻¹)
- t - tijd (d)
- z - diepte (cm; positieve richting is opwaarts)
- θ - vochtgehalte (-)



Figuur 2.1 Situatieschets voor onverzadigde zone

Tussen het vochtgehalte en de drukhoogte bestaat een verband dat vaak via de zogeheten differentieële vochtcapaciteit (C) wordt uitgedrukt:

$$C(h) = \frac{d\theta}{dh} \quad (2)$$

Met andere woorden, er wordt aangenomen dat het vochtgehalte en de doorlatendheid uitsluitend een functie van de drukhoogte en eventueel van de lokale bodemeigenschappen zijn.

De combinatie van deze twee formules levert één vergelijking op voor de drukhoogte:

$$C(h)\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(h)\left(\frac{\partial h}{\partial z}+1\right)\right) + S(h,z) \quad (3)$$

In de vergelijkingen komen twee eigenschappen van de bodem voor, de doorlatendheid en de differentiële vochtcapaciteit. Deze zijn niet alleen een functie van het type bodem maar ook van de drukhoogte, zodat de vergelijkingen over het algemeen niet-lineair zijn en plaatsafhankelijk. Wanneer de bodem verzadigd is, dan is de differentiële vochtcapaciteit gelijk aan nul en verdwijnt de tijdsafgeleide uit de vergelijking. Deze verandering in het karakter van de vergelijking werkt op een paar punten door. Dit zal nader besproken worden in hoofdstuk 3.

De bronterm $S(h,z)$ kan verschillende achtergronden hebben, zoals onttrekking van water door plantewortels of verdamping. De term kan ook worden gebruikt om effecten in de twee horizontale richtingen te beschrijven, afspoeling of basisdrainage bijvoorbeeld.

De randvoorwaarden die in de praktijk voor deze vergelijking worden gebruikt zijn van tweeërlei aard:

- Voorgeschreven drukhoogte: op een bepaalde diepte z is de drukhoogte gegeven.
- Voorgeschreven flux: op een bepaalde diepte z is de flux gegeven.

Voor de bovenrand treden beide typen op:

- Voorgeschreven drukhoogte: bijvoorbeeld als het regenwater niet snel genoeg door de bodem kan worden afgevoerd.
- Voorgeschreven flux: als er verdamping optreedt of de regen snel genoeg kan worden afgevoerd.

Terwijl de bovenrand vast ligt (het maaiveld), zal voor de onderrand een enigszins willekeurige keuze gemaakt moeten worden: vergelijking (1) beschrijft een één-dimensionale grondwaterstroming. Zodra horizontale gradiënten een niet te verwaarlozen rol spelen, moet de modelvergelijking ook die effecten in beschouwing nemen.

In het geval van MOZART zal de onderrand daarom liggen op een diepte waar de grondwaterstand gewoonlijk boven ligt. Dit maakt het mogelijk de grondwaterstroming onder dit niveau te bepalen met een verzadigd grondwatermodel. Voor de onderrand zal vooral het tweede type randvoorwaarde van belang zijn: de fluxrandvoorwaarde (wegzijging dan wel kwel) wordt bepaald door een model voor de verzadigde zone.

Behalve randvoorwaarden aan de grenzen van de beschouwde bodemlaag heeft men ook te maken met "interne" randvoorwaarden, namelijk daar waar de bodemeigenschappen een sprong vertonen. In dit geval moet geëist worden dat de drukhoogte op het grensvlak continu is (anders zou er een extra stroming optreden) en dat de flux continu is (er zou anders water verdwijnen).

Dit alles stelt eisen aan het model:

- De gebruikte numerieke methode moet beide soorten randvoorwaarden aan kunnen en moet geen moeite hebben met de verzadigde zone.
- Het model moet onder bepaalde omstandigheden het karakter van de randvoorwaarden wijzigen: als door regenval de bodem (bijna) verzadigd is geraakt, zullen zich plassen vormen op het maaiveld. Dat betekent in plaats van een fluxrandvoorwaarde (regen) ten gevolge van interne omstandigheden (verzadiging) een verandering van de randvoorwaarde (voorgeschreven drukhoogte).

Om deze redenen is de keuze gevallen op een impliciet rekenschema:

- Het rekenschema is gebaseerd op een schema dat, althans voor lineaire differentiaalvergelijkingen, onvoorwaardelijk stabiel is.
- Het rekenschema is van dien aard dat de differentiële vochtcapaciteit zonder probleem nul kan worden.

2.2 Details van het rekenschema

De numerieke methode die uit de literatuur naar voren is gekomen is afgeleid uit verschillende methoden. Voor details wordt verwezen naar het rapport Afwegingen numerieke methoden in MOZART (WL, 1994). De achtergronden hiervoor zijn, dat geen enkele auteur een bevredigende oplossing biedt voor het probleem van volumebehoud, terwijl dit voor waterkwaliteitsberekeningen van groot belang is. Een oplossing echter is de gediscretiseerde vergelijking af te leiden via "eindige volumes" (zie bijvoorbeeld WL, 1988).

De gediscretiseerde vergelijking wordt als volgt afgeleid:

- Definieer het numerieke rooster als volgt:
 - de bodem wordt verdeeld in n opeenvolgende "binnensegmenten"
 - elk segment i wordt gekenmerkt door een roosterpunt z_i en twee grensvlakken ter plaatse $z_{i-1/2}$ en $z_{i+1/2}$, zodanig dat het grensvlak precies tussen twee roosterpunten ligt:

$$z_{i-1/2} = (z_{i-1} + z_i)/2, \quad i = 1, \dots, n+1 \quad (4)$$

De roosterpunten z_0 en z_{n+1} vallen zijn zogenaamde virtuele punten en vallen buiten het rekengebied. Deze punten worden gebruikt voor de implementatie van de randvoorwaarden. Hieraan zijn twee "randsegmenten" geassocieerd die eveneens buiten het rekengebied vallen en waarop de externe condities betrekking hebben.

De afstand tussen de roosterpunten z_i en z_{i+1} wordt aangeduid met $\Delta z_{i+\frac{1}{2}}$. De afstand tussen de grensvlakken, het "volume" van het segment is:

$$V_i = z_{i+\frac{1}{2}} - z_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(z_{i+1} - z_{i-1}) \quad (5)$$

- Integreer de oorspronkelijke differentiaalvergelijking (1) over segment i.
- De resulterende vergelijking is:

$$\frac{d}{dt} \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} \theta dz = K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{z_{i-\frac{1}{2}}} - K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{z_{i+\frac{1}{2}}} + \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} S(h, z) dz \quad (6)$$

waarin de fluxen over de twee grensvlakken duidelijk te herkennen zijn.

- Voer nu de volgende grootheden in:
 - θ_i^j - het (gemiddelde) vochtgehalte in segment i op tijdstip j
 - h_i^j - de drukhoogte in het roosterpunt behorend bij segment i (ter plaatse van z_i) op tijdstip j
- Schat de ruimtelijke gradiënten en de gradiënten in de tijd:

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_i^{j+1}}{dt} &\approx \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} \\ \frac{\partial h^{j+1}}{\partial z} \Big|_{z_{i+\frac{1}{2}}} &\approx \frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z_i} \end{aligned} \quad (7)$$

- Schat de doorlatendheid op het grensvlak bij een inhomogene bodem door een schatting van de doorlatendheid in de omliggende roostercellen:

$$K_{i+\frac{1}{2}}^j \approx \frac{2K(h_i^j) K(h_{i+1}^j)}{K(h_i^j) + K(h_{i+1}^j)} \quad (8)$$

Deze zogeheten harmonische middeling wordt nader toegelicht in Appendix A.

Voor een homogene bodem wordt de doorlatendheid op het grensvlak direct geschat aan de hand van de h ter hoogte van het grensvlak, oftewel:

$$K_{i+\frac{1}{2}}^j = K(h_{i+\frac{1}{2}}^j) \quad , \quad \text{met } h_{i+\frac{1}{2}}^j \approx 0.5 * (h_i^j + h_{i+1}^j) \quad (9)$$

- Schat de bronterm bijvoorbeeld als volgt:

$$\int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} S(h,z) dz \approx S(h_i^j, z_i) V_i \quad (10)$$

Dit is niet de enige mogelijkheid zoals in het volgende hoofdstuk aan de orde komt. De aard van de bronterm zal in grote mate bepalend zijn voor de uiteindelijke keuze.

- Randvoorwaarden met een voorgeschreven flux zijn eenvoudig te implementeren: in plaats van coëfficiënten te berekenen kun je eenvoudig de flux invullen in de vergelijking voor het segment dat net boven of net onder de betreffende rand ligt. Voor randvoorwaarden met voorgeschreven drukhoogte kan in de gediscretiseerde vergelijkingen eenvoudig de drukhoogte worden ingevuld.
- Overgangen in de bodemeigenschappen (bijvoorbeeld een laag klei in een overigens zandige bodem) gaan gepaard met interne randvoorwaarden: ondanks de sprong in bodemeigenschappen mag de flux noch de drukhoogte een sprong vertonen. Het rekenschema moet daarmee rekening houden. Dit kan elegant worden afgehandeld via de middelingsprocedure die is beschreven in Appendix A. Het voordeel van deze methode is dat een overgang in bodemeigenschappen geen enkel gevolg heeft voor het rooster en dat alle grootheden eenduidig gedefinieerd zijn per cel. (Een bijkomend voordeel is dat hierdoor de modelresultaten eenvoudig te gebruiken zijn in een waterkwaliteitsberekening.)

Verder wordt de zogenaamde theta-methode ingevoerd ten behoeve van de robuustheid. Om verwarring met de variabele voor het vochtgehalte te voorkomen is in de formules r_1 en r_2 (r voor relaxatiefactoren) gebruikt in plaats van de bij wiskundigen gebruikelijke notatie Θ_1 cq Θ_2 . In Appendix H wordt een nadere toelichting gegeven op de theta-methode. In het vervolg hebben alle Θ symbolen betrekking op het vochtgehalte.

Gebruikmakend van de hiervoor gedefinieerde symbolen discretiseren we vergelijking (1) als:

$$V_i \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+r_1}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} (h_{i+1}^{j+r_1} - h_i^{j+r_1} + \Delta z_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+r_1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} (h_i^{j+r_1} - h_{i-1}^{j+r_1} + \Delta z_{i-\frac{1}{2}}) + S_i^{j+r_2} \quad (11)$$

Zoals uit de formule blijkt wordt gebruik gemaakt van de h-waarden en K-waarden op een tussentijdstip $j+r_1$. De K waarden worden bepaald ter hoogte van het grensvlak tussen twee roosterpunten, terwijl de h-waarden voor de roosterpunten bepaald worden.

De volgende benaderingen worden in (11) gebruikt:

$$h_i^{j+r_1} = r_1 h_i^{j+1} + (1-r_1) h_i^j \quad (12)$$

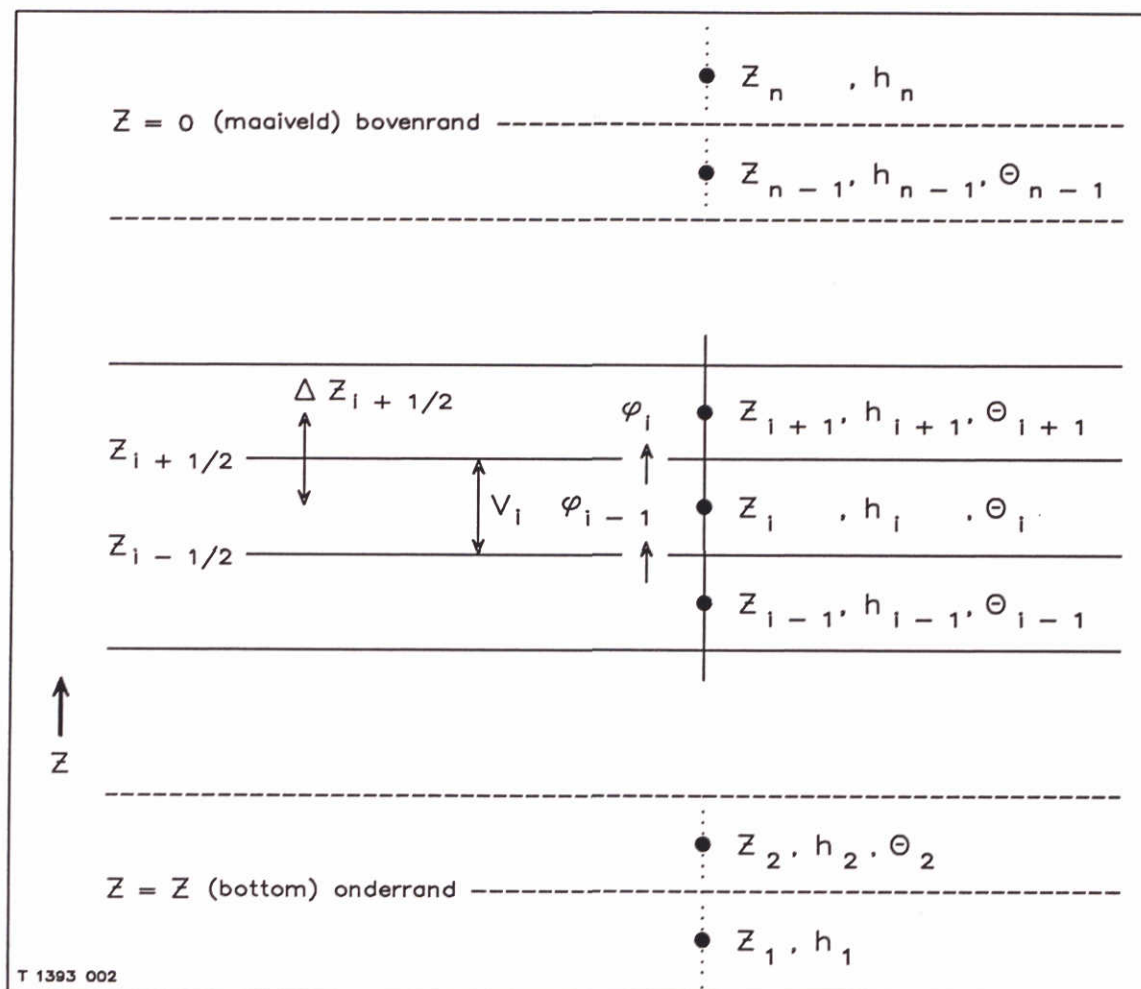
$$K_i^{j+r_1} = K(h_i^{j+r_1}) \quad (13)$$

$$S_i^{j+r_2} = S(r_2 h_i^{j+1} + (1-r_2) h_i^j) \quad (14)$$

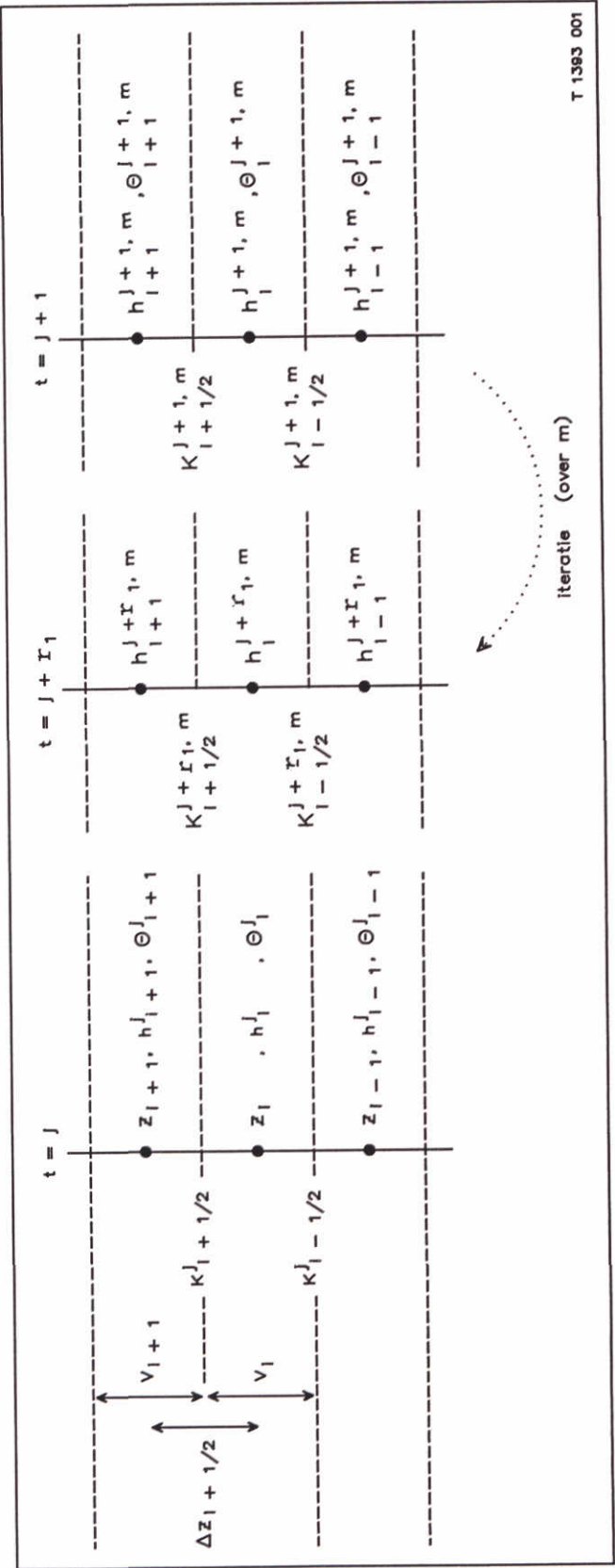
Voor de fluxen en voor de brontermen worden dus verschillende relaxatiefactoren r gebruikt. Voor de fluxen geldt dat een $r_1 > 0.5$ altijd extra damping (dissipatie) in de tijd geeft. Voor de brontermen geldt echter dat ze zowel een groei als een afname van het vochtgehalte kunnen veroorzaken. In het eerste geval is een $r_2 < 0.5$ gewenst, en in het tweede geval een $r_2 > 0.5$ om extra damping in de tijd te verkrijgen indien gewenst. Voorlopig is een vaste $r_2=0.5$ genomen (zie ook Appendix G, waarbij een en ander voor de predictor-corrector methode wordt afgeleid).

Figuur 2.2 en figuur 2.3. geven een illustratie van de plek waarop de verschillende variabelen gedefinieerd zijn.

Figuur 2.2.



Figuur 2.3.



Het massabehoudende schema (11) wordt nu met een iteratieve methode opgelost in verband met de aanwezige niet-lineariteiten.

Beschouw de onbekenden $\Theta_i^{j+1,m}$ en $h_i^{j+1,m}$, de m-de iteratief bepaalde benaderingen van Θ_i^{j+1} en h_i^{j+1} . Voor deze variabelen stellen we een gelineariseerde vergelijking op.

$\Theta_i^{j+1,m}$ kan in termen van $h_i^{j+1,m}$ en waarden op het vorige iteratieniveau worden uitgedrukt door gebruik te maken van de differentiële vochtcapaciteit $C(h)$.

Er geldt:

$$\begin{aligned}\theta_i^{j+1,m} &= \theta_i^{j+1,m-1} + (\theta_i^{j+1,m} - \theta_i^{j+1,m-1}) \approx \\ &\approx \theta_i^{j+1,m-1} + C_i^{j+1,m-1} (h_i^{j+1,m} - h_i^{j+1,m-1})\end{aligned}\quad (15)$$

De coëfficiënt K wordt ook direkt meegenomen in het iteratieve algoritme. Verder voeren we onderrelaxatie in voor K en C om convergentieproblemen te vermijden. Hiervoor gebruiken we een relaxatiefactor ω_1 . Een dergelijke factor zou ook voor de brontermen gebruikt kunnen worden. Voorlopig is voor de brontermen echter nog geen relaxatie toegepast ($\omega_2 = 1$).

Het iteratieve oplosschema wordt daarmee:

$$\theta_i^{j+1,m-1} = \theta(h_i^{j+1,m-1}) \quad (16)$$

$$K_i^{j+r_1,m-1} = \omega_1 K(r_1 h_i^{j+1,m-1} + (1-r_1) h_i^j) + (1-\omega_1) K_i^{j+r_1,m-2} \quad (17)$$

$$C_i^{j+1,m-1} = \omega_1 C(h_i^{j+1,m-1}) + (1-\omega_1) C_i^{j+1,m-2} \quad (18)$$

$$S_i^{j+r_2,m-1} = \omega_2 S(r_2 h_i^{j+1,m-1} + (1-r_2) h_i^j) + (1-\omega_2) S_i^{j+r_2,m-2} \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
V_i C_i^{j+1,m-1} \frac{\Delta h_i^{j+1,m}}{\Delta t} - r_1 \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} (\Delta h_{i+1}^{j+1,m} - \Delta h_i^{j+1,m}) + r_1 \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} (\Delta h_i^{j+1,m} - \Delta h_{i-1}^{j+1,m}) = \\
= -V_i \frac{\theta_i^{j+1,m-1} - \theta_i^j}{\Delta t} \\
+ \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} [r_1 h_{i+1}^{j+1,m-1} + (1-r_1) h_{i+1}^j - r_1 h_i^{j+1,m-1} - (1-r_1) h_i^j + \Delta z_{i+\frac{1}{2}}] \\
- \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} [r_1 h_i^{j+1,m-1} + (1-r_1) h_i^j - r_1 h_{i-1}^{j+1,m-1} - (1-r_1) h_{i-1}^j + \Delta z_{i-\frac{1}{2}}] \\
+ S_i^{j+r_2,m-1}
\end{aligned} \tag{20}$$

De onbekende in de lineaire iteratievergelijking is de $\Delta h_i^{j+1,m}$. Deze variabele is gedefinieerd door:

$$\Delta h_i^{j+1,m} = h_i^{j+1,m} - h_i^{j+1,m-1} \tag{21}$$

De nieuwe iteratief bepaalde h-waarde wordt volgt dus uit:

$$h_i^{j+1,m} = h_i^{j+1,m-1} + \Delta h_i^{j+1,m} \tag{22}$$

De truc van vergelijking (20) is dat het rechterlid de termen van vergelijking (11) bevat (gebruikmakend van vergelijking (12)). Het linkerlid van (20) bevat termen als $\Delta h_i^{j+1,m}$. Als de iteratieve methode convergeert gaan deze termen naar nul. Dit betekent dat de oorspronkelijke vergelijking (11) is opgelost.

Randvoorwaarden kunnen eenvoudig geïmplementeerd worden. Bijvoorbeeld, een opgelegde h aan de onderrand wordt als volgt gediscetiseerd:

$$\frac{1}{2}(h_0^{j+1} + h_1^{j+1}) = h_{opgelegd}(t=t^{j+1}) \tag{23}$$

waarbij de rand tussen de roosterpunten z_0 en z_1 ligt.

Een opgelegde flux aan de bovenrand, tussen roosterpunt z_n en z_{n+1} , wordt gediscetiseerd als:

(vul de opgelegde flux in in de vergelijking:)

$$\frac{K_{n+\frac{1}{2}}^{j+r_1}}{\Delta z_{n+\frac{1}{2}}} (h_{n+1}^{j+r_1} - h_n^{j+r_1} + \Delta z_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^j}^{t^{j+1}} q_{opgelegd} dt \quad (24)$$

met benaderingen zoals reeds eerder gegeven in (12), dus

$$h_i^{j+r_1} = r_1 h_i^{j+1} + (1-r_1) h_i^j \quad (25)$$

etcetera.

Voor het geval van een opgelegde druk op de onderrand en een opgelegde flux aan de bovenrand wordt het stelsel vergelijkingen (16) tot en met (20) gecombineerd met:

$$\frac{1}{2} \Delta h_0^{j+1,m} + \frac{1}{2} \Delta h_1^{j+1,m} = h_{opgelegd}^{j+1} - \frac{1}{2} (h_0^{j+1,m-1} + h_1^{j+1,m-1}) \quad (26)$$

$$\begin{aligned} & r_1 \frac{K_{n+\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{n+\frac{1}{2}}} (\Delta h_{n+1}^{j+1,m} - \Delta h_n^{j+1,m}) = \\ & = - \frac{K_{n+\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{n+\frac{1}{2}}} [r_1 h_{n+1}^{j+1,m-1} + (1-r_1) h_{n+1}^j - r_1 h_n^{j+1,m-1} - (1-r_1) h_n^j + \Delta z_{n+\frac{1}{2}}] \\ & \quad + \frac{1}{\Delta t} \int_{t^j}^{t^{j+1}} q_{opgelegd} dt \end{aligned} \quad (27)$$

Als initialisatie worden de variabelen op tijdstip $j+1$ gelijk gesteld aan de waarden op tijdstip j .

Het stelsel dat moet worden opgelost ziet er als volgt uit:

$$a_i \Delta h_{i-1} + b_i \Delta h_i + c_i \Delta h_{i+1} = f_i \quad (28)$$

Voor notatiedoeleinden laten we in het vervolg i van 1 naar n lopen; coëfficiënten horende bij indices buiten deze range zijn per definitie nul.

Het resulterende stelsel is een zogenaamd tridiagonaal stelsel: per vergelijking zijn er de onbekenden Δh_i , Δh_{i-1} en Δh_{i+1} voor een bepaald tijdstip. Voor dergelijke stelsels bestaat een zeer efficiënt algoritme, zodat het oplossen ervan weinig rekentijd vergt. De oplossing kan

gevonden worden via eliminatie volgens Gauss.¹ De eerste stap:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= b_1, \beta_1 = c_1, \phi_1 = f_1 \\ i \geq 2: \quad \alpha_i &= b_i - \left(\frac{a_i}{\alpha_{i-1}}\right)c_{i-1}, \beta_i = c_i, \phi_i = f_i - \left(\frac{a_i}{\alpha_{i-1}}\right)\phi_{i-1} \\ i = 1, \dots, n: \quad \alpha_i h_i + \beta_i h_{i+1} &= \phi_i \end{aligned} \quad (29)$$

en de tweede stap:

$$\begin{aligned} h_n &= \phi_n / \alpha_n \\ i = n-1, n-2, \dots, 1: \quad h_i &= \frac{\phi_i - \beta_i h_{i+1}}{\alpha_i} \end{aligned} \quad (30)$$

¹ Het algoritme voor tridiagonale matrices staat in de angelsaksische literatuur bekend als het algoritme van Thomas.

3 Analyse van de numerieke methode

Voorafgaand aan de toepassing op drie praktische gevallen geven we een korte beschouwing over de oorspronkelijke vergelijking en over een aantal eigenschappen van de algemene numerieke methode.

3.1 Stationair vochtprofiel

De differentiaalvergelijking kan in een aantal gevallen analytisch worden opgelost. Een van die gevallen is constante verdamping, zodat een stationaire situatie ontstaat (de bronterm wordt buiten beschouwing gelaten). In vergelijking (1) kan de afgeleide naar de tijd van het vochtgehalte nul worden gesteld, zodat het stationaire profiel wordt gevonden. Dit houdt in dat de vergelijking eenmaal geïntegreerd kan worden naar de plaatscoördinaat:

$$K\left(\frac{dh}{dz} + 1\right) = \text{constant} = -q_z \quad (31)$$

De parameter q_z is een integratieconstante met de betekenis van een flux. Als de waarde positief is, is er sprake van verdamping. Wanneer de doorlatendheid kan worden benaderd met een analytische functie, dan kan een gesloten uitdrukking worden verkregen voor de drukhoogte.

Uit de bovenstaande vergelijking blijkt dat in zo'n stationaire situatie de ene randvoorwaarde de flux kan zijn: die is dan identiek aan de eerste integratieconstante. De tweede randvoorwaarde moet echter de drukhoogte voorschrijven, omdat anders de absolute waarde onbepaald is. Met andere woorden: *de stationaire oplossing is onbepaald als er twee fluxrandvoorwaarden worden opgegeven.*

Er kunnen zich twee situaties voordoen:

- de twee fluxrandvoorwaarden zijn met elkaar in evenwicht (er gaat over de gehele bodemlaag, dus inclusief eventuele onttrekkingen, evenveel water in als uit). In dat geval zijn er fysisch gesproken meerdere oplossingen mogelijk: de grondwaterstand kan op een willekeurig niveau liggen. Wanneer zo'n probleem echter dynamisch wordt opgelost, dan is de stationaire oplossing wel bepaald, maar hangt het uiteindelijke resultaat af van de begintoestand.
- de twee fluxrandvoorwaarden zijn niet met elkaar in evenwicht: er is een netto onttrekking of een netto toevoer van water. Op den duur loopt de bodem geheel vol of geheel leeg en uiteindelijk is er geen fysisch aanvaardbare oplossing meer. In dit geval bestaat er geen stationaire oplossing.

Het numeriek-wiskundige equivalent van de situatie kan eenvoudig geïllustreerd worden met een schematisering met twee segmenten. Uit vergelijking (11) volgt voor $i=1$ en $i=2$:

$$V_1 \frac{\theta_1^{j+1} - \theta_1^j}{\Delta t} = V_1 C_1 \frac{\Delta h_1}{\Delta t} = \frac{K_{1\frac{1}{2}}^{j+r_1}}{\Delta z_{1\frac{1}{2}}} (h_2^{j+r_1} - h_1^{j+r_1} + \Delta z_{1\frac{1}{2}}) - \phi \quad (32)$$

$$V_2 \frac{\theta_2^{j+1} - \theta_2^j}{\Delta t} = V_2 C_2 \frac{\Delta h_2}{\Delta t} = -\frac{K_{1\frac{1}{2}}^{j+r_1}}{\Delta z_{1\frac{1}{2}}} (h_2^{j+r_1} - h_1^{j+r_1} + \Delta z_{1\frac{1}{2}}) + \phi \quad (33)$$

Hierin is ϕ de opgelegde fluxrandvoorwaarde. Wanneer men naar een stationaire situatie toe gaat, dan worden de termen aan de linkerkant nul, omdat de verschillen tussen de tijdstappen steeds geringer worden. Maar het is eenvoudig na te gaan dat dat niet betekent dat het stelsel vergelijkingen waarmee we $h_1^{j+r_1}$ en $h_2^{j+r_1}$ bepalen geen eenduidige oplossing meer zou hebben. Uiteindelijk zal het schema naar waarden convergeren naar waarden van θ en h , die zowel de linker- als de rechterleden van vergelijkingen (32) en (33) zullen doen verdwijnen, waarmee de (stationaire) evenwichtstoestand bereikt is. Als aan onder- en bovenkant echter verschillende fluxrandvoorwaarden worden opgelegd (ϕ heeft in (32) en (33) verschillende waarden), dan bestaat een dergelijke stationaire situatie niet, en zal de oplossing voortdurend blijven veranderen.

De oplossing is echter wel onbepaald als de termen aan de linkerkant van (32) en (33) om andere redenen verdwijnen, bijv. omdat de grond overal verzadigd is ($C=0$) of omdat we de stationaire vergelijkingen trachten op te lossen ($\Delta t \rightarrow \infty$). Het is zelfs mogelijk dat er geen enkele oplossing bestaat, omdat het stelsel vergelijkingen strijdig is. Dit komt overeen met het hiervoor genoemde geval van verschillende fluxen op de randen, waarvoor inderdaad geen stationaire oplossing mogelijk was.

In de praktijk kunnen we een dergelijke "stationaire" uitzonderingssituatie nagenoeg altijd vermijden, door Δt desnoods heel groot, maar nooit "oneindig" groot te nemen. Blijft natuurlijk het feit dat als de twee fluxrandvoorwaarden niet met elkaar in evenwicht zijn, de oplossing uiteindelijk fysisch onaanvaardbaar wordt. Dit is echter het *gevolg* van het opleggen van fysisch onrealistische fluxen aan de randen, en *niet* een tekortkoming van het model als zodanig.

De combinatie van twee fluxrandvoorwaarden is in de praktijk erg belangrijk. Er is een uitweg uit de eis dat de fluxen op de rand met elkaar in evenwicht moeten zijn, namelijk de bronterm. Door drainage en andere onttrekkingsmechanismen zal de grondwaterstand gereguleerd worden en dat heeft voor het karakter van de vergelijking consequenties. Er is dan een mechanisme om een tekort of overschot aan water op te heffen, mits de bronterm afhankelijk is van de drukhoogte of de grondwaterstand en er een evenwicht kan ontstaan.

De volgende conclusies kunnen getrokken worden over deze situatie:

- Het mathematisch-fysische probleem met twee fluxrandvoorwaarden is slechts onder bepaalde omstandigheden een goed gesteld probleem. De voorwaarden, een zogeheten compatibiliteitseis, komen er ruwweg op neer dat de som van opgelegde in- en uitgaande fluxen gemiddeld over langere tijd nul moet zijn, aangezien het model nu niet over een rand beschikt waarmee de massabalans gecorrigeerd kan worden.
- Het toepassen van een bron- of putterm die een functie is van bijvoorbeeld de te berekenen drukhoogte zou ook zo'n correctiemechanisme kunnen vormen, maar dit moet toelaatbaar zijn binnen de fysica van het probleem.
- De uiteindelijk te bereiken evenwichtstoestand is een functie van de initiële conditie en is dus betekenisloos als die initiële conditie slechts een ruwe schatting was.
- Het numerieke schema moet perfect massabehoudend zijn. Een kleine afwijking zorgt voor een verschil tussen de numerieke compatibiliteitseis en de analytische. Dit zou problemen kunnen geven die moeilijk op te lossen zijn.

3.2 Het effect van brontermen

Voor de bron- en puttermen in MOZART wordt een expliciet tijdsintegratieschema voorgesteld met de veronderstelling dat de tijdschaal van een dergelijke term (gegeven door de inverse van de Jacobiaan, i.e., $\partial S/\partial \theta (= 1/C \partial S/\partial h)$) in het algemeen groot is. Dit is een redelijke veronderstelling voor wat betreft brontermen die verdamping of onttrekking door de wortels modelleren (want dergelijke bron/put-termen zijn relatief klein), maar het geldt niet voor termen die de afwatering modelleren.

Afwatering wordt gemodelleerd door bron/puttermen van de vorm:

$$\begin{aligned} S(h,z) &= 0, & \text{als } z > z_g \\ S(h,z) &= -\kappa \max(0, z_g - z_{ref}), & \text{als } z < z_g \end{aligned} \quad (34)$$

waarin:

- z - de verticale coördinaat
- z_g - de positie van de grondwaterspiegel
- z_{ref} - het referentieniveau, dat bijvoorbeeld het waterniveau in een afwateringskanaal representeert.

De tijdschaal van deze afwateringsterm kan heel klein zijn. Dat hoeft niet tot problemen te leiden zolang de grondwaterspiegel maar niet snel en/of veel verandert, maar daar kan men in het algemeen niet van uitgaan. Als voorbeeld kan de situatie genoemd worden van een fikse regenbui op een goed doorlatende bodem. Vanwege de goede afwatering wordt de snelle stijging van de grondwaterspiegel na de bui onmiddellijk gevolgd door een snelle daling, hetgeen gemodelleerd dient te worden met een betrekkelijk grote afwateringsterm. De tijdschaal van dergelijke fenomenen is van de orde van een dag. Dit is ook de tijdstap die men, om redenen van efficiëntie, bij voorkeur in het numerieke schema zou gebruiken.

Dit vereist speciale numerieke maatregelen. Zo is het vanwege de stabiliteit van het schema in ieder geval nodig de tijdsintegratie van de betreffende bron/putterm impliciet uit te voeren.

Deze impliciete tijdsintegratie zou gelineariseerd impliciet of volledig impliciet kunnen zijn. In het laatste geval dient dan het resulterende stelsel niet-lineaire vergelijkingen iteratief te worden opgelost. In beide gevallen is een goede linearisatie van het stelsel vergelijkingen zeer gewenst, ten behoeve van de nauwkeurigheid dan wel ter verkrijging van een snelle convergentie.

Er moet dan geconstateerd worden dat linearisatie enerzijds niet goed mogelijk is en anderzijds een vervelende consequentie heeft:

- De afwateringsterm kan een niet-gladde functie van de grondwaterstand zijn, in welk geval de linearisatie problematisch is en in het algemeen onnauwkeurig. Voor de praktijk betekent dit dat er ofwel toch sprake zal zijn van een beperking aan de tijdstap, ofwel dat er veel iteraties per tijdstap nodig zullen zijn. In beide gevallen is het voordeel van de impliciete aanpak verdwenen.
- De afwateringsterm is niet een functie van de lokale drukhoogte, maar van de grondwaterstand. Linearisatie vereist echter de evaluatie van $\partial S / \partial h$, want het stelsel vergelijkingen is geschreven in de onbekende h . Hiervoor geldt:

$$\frac{\partial S}{\partial h} = \frac{\partial S}{\partial z} / \left(\frac{\partial h}{\partial z} \right) \Big|_{z=z_g} \quad (35)$$

(dus $\partial h / \partial z$ moet geëvalueerd worden op $z = z_g$)

Met andere woorden, $\partial S / \partial h$ hangt *niet* af van het lokale gedrag van de oplossing h , maar (uiteraard) van het gedrag van h in de omgeving van de grondwaterstand. Afgezien van het probleem hoe een en ander numeriek te evalueren, betekent dit dat de bestaande tridiagonale structuur van de op te lossen stelsels algebraïsche vergelijkingen erdoor zou worden verstoord, hetgeen natuurlijk zeer ongewenst is.

Samenvattend kunnen we stellen dat het mogelijke succes van een impliciete tijdsintegratie van een afwateringsterm zeer dubieus is en de realisatie ervan in ieder geval een enorme inspanning zal vragen. Dit wordt dan ook ten zeerste afgeraden.

Het alternatief, expliciete tijdsintegratie, is in ieder geval snel te realiseren. Wij verwachten dat het betrekkelijk probleemloos goed werkend te krijgen is, mits de tijdstap maar voldoende klein gekozen wordt.

De tijdstap waarbij goede resultaten worden bereikt kan natuurlijk inefficiënt klein blijken te zijn. We constateren echter dat het zeker niet nodig zal zijn een dergelijke kleine tijdstap gedurende de gehele simulatieperiode te gebruiken. Bijvoorbeeld, een plotselinge sterke toevoer van water aan de bovenzijde van het model (voor het modelleren van een flinke regenbui) is ofwel tijdelijk, ofwel stelt er zich een nieuw evenwicht in. In beide gevallen hoeft er maar gedurende een korte periode (hooguit enige dagen) met een relatief kleine tijdstap (klein ten opzichte van de te modelleren fysica) gewerkt te worden. Dit heeft in ieder geval het voordeel dat de tijdsintegratie altijd behoorlijk nauwkeurig zal zijn.

Dit zou kunnen leiden tot de volgende procedure:

- Er wordt in principe gewerkt met een tijdstap die zodanig gekozen is dat globaal nauwkeurige resultaten verkregen worden.
- In elke iteratie worden op basis van het gevonden drukhoogteprofiel h^j de bron- en puttermen uitgerekend.
- Vervolgens wordt gekeken naar het maximum over het hele rekengebied van de grootheid $S(h^{j+r2}, z) - S(h^j, z)$. Afhankelijk van het aantal malen dat deze grootheid groter is dan een ingestelde grenswaarde wordt de tijdstap verkleind. Een en ander moet zo geïmplementeerd worden dat er in ieder geval altijd een oplossing op de oorspronkelijke tijdniveaus beschikbaar is. De grenswaarde kan gebaseerd worden op een typische fluxgradiënt of een andere karakteristieke grootheid met de correcte dimensie, vermenigvuldigd met een coëfficiënt die veel kleiner is dan 1. Enige calibratie van deze parameter zal in het algemeen onvermijdelijk nodig zijn.

De beperking aan de tijdstap is niet gebaseerd op een of ander stabiliteitscriterium. Vanwege het sterk impliciete karakter van het schema lijkt dit op voorhand niet nodig te zijn. Dit wordt bevestigd door de eerste ervaringen met dit schema: zolang de tijdstap maar klein genoeg wordt gekozen is een redelijk nauwkeurige simulatie mogelijk. Als aan deze laatste voorwaarde echter niet meer voldaan wordt, kunnen door de expliciete brontermen en coëfficiënten veroorzaakte stabiliteitsproblemen ontstaan. Vandaar de bovenstaande veiligheidsprocedure, die gezien de aard van het probleem de meest aangewezen techniek lijkt. Hij combineert efficiëntie met robuustheid en nauwkeurigheid, en is daarnaast betrekkelijk eenvoudig te realiseren.

3.3 Stabiliteit en oscillaties

Convergentiegedrag

In paragraaf 2.2. is het stelsel op te lossen vergelijkingen uitgedrukt in Δh (vergelijkingen (16) tot en met (20), (26) en (27), uiteindelijk leidend tot het tridiagonale stelsel (28)).

Uitdrukken van het stelsel in Δh heeft de volgende voordelen:

- het stelsel wordt minder gevoelig voor afrondfouten.
- de convergentie kan gecheckt worden door het maximum van de absolute waarden van de Δh_i te monitoren.
- als het schema convergeert en $\Delta h_i^{j+1,m}$ gaat naar nul, dan wordt het linkerlid van vergelijking (20) gelijk aan nul. Dat wil zeggen dat vergelijking (11) is opgelost.
- door gebruik te maken van de Δ formulering is het mogelijk om convergentieversnellende trucs in het linkerlid toe te voegen, **zonder** dat de uiteindelijke oplossing verandert (immers dan geldt dat het rechterlid nul is).
- De Δ formulering geeft dus een scheiding tussen datgene wat de convergentiesnelheid bepaalt (= de oplossingsstrategie in de linkerleden) en datgene wat de uiteindelijke oplossing bepaalt (= de discretisatie in de rechterleden).

Oscillaties

Het gebruik van centrale differenties kan leiden tot oscillerende oplossingen: het is de combinatie van ruimtelijke afgeleiden van eerste en tweede orden die hiervoor verantwoordelijk is. Omdat de vergelijking niet-lineair is, is het onmogelijk of in ieder geval ondoenlijk om een volledige analyse uit te voeren van het numerieke schema. Door de vergelijkingen te lineariseren en te kijken naar kleine afwijkingen van een berekende oplossing is het mogelijk een benaderend criterium aan te geven voor het optreden van oscillaties. Deze analyse wordt hier niet in detail beschreven, omdat het om eenvoudige maar uitgebreide algebraïsche bewerkingen gaat van de formules in paragraaf 2.2.

Uiteindelijk echter leidt de analyse tot de voldoende voorwaarden die ruimtelijke oscillaties voorkomen:

$$\left| \frac{d \ln K}{dh} \right| \cdot \Delta z < 2 \quad \text{oftewel} \quad \left| \frac{1}{K} \frac{dK}{dh} \right| \cdot \Delta z < 2 \quad (36)$$

In de buurt van de verzadiging is de verandering in de doorlatendheid relatief groot, dus is de maximale stapgrootte relatief klein. In de praktijk zijn er altijd cellen rond verzadiging, bijvoorbeeld de cellen dichtbij en onder de grondwaterstand, of bij een indringend vochtfront. Het criterium blijkt met name belangrijk in sommen met een indringend vochtfront. Tabel 3.1. geeft een overzicht van de stapgrootte volgens het criterium voor de diverse bodemtypes. Uit de pF en Kh curves is bij een nog net niet verzadigde bodem de maximale stapgrootte volgens het criterium bepaald. De getallen zijn afgerond; aangezien ze zijn berekend uit een tabel met een beperkt aantal discrete waarden moeten ze meer opgevat worden als een orde van grootte dan als absoluut maatgevend.

Tabel 3.1. Maximale stapgroottes (in cm) voor verschillende bodemtypes

bovengronden:		ondergronden:	
B1	22	O1	7
B2	3	O2	8
B3	18	O3	8
B4	20	O4	20
B7	4	O5	20
B8	4	O6	4
B10	2	O8	5
B11	2	O9	6
B12	3	O10	17
B16	6	O11	9
B18	10	O12	8
		O13	2
		O15	4
		O16	5
		O17	4

Het is moeilijk om noodzakelijke voorwaarden af te leiden waaraan de discretisatie moet voldoen om ruimtelijke oscillaties te voorkomen. Voldoende voorwaarden zijn hierboven al aangegeven. Voor wat betreft de stabiliteit in de tijd geldt dat het impliciete schema onvoorwaardelijk stabiel is. Hoeveel iteraties daarvoor nodig zijn moet blijken uit het testprogramma. In het testprogramma wordt wel een bovengrens gesteld aan het aantal iteraties. Als in een tijdstap dit aantal bereikt wordt, wordt de dan gevonden, nog niet uitgeconvergeerde, oplossing beschouwd als de finale oplossing. Door dit afbreken van de iteraties, terwijl de methode nog niet geconvergeerd is, zouden numerieke problemen kunnen ontstaan. Dit aspect is in de tests meegenomen.

3.4 Verbeteringen aan het numerieke schema

Er zijn twee relevante wijzigingen van het numerieke schema. De eerste heeft betrekking op een convergentiever snelling, die tevens singulariteiten in het op te lossen stelsel voorkomt. De tweede wijziging betreft het geval van twee fluxrandvoorwaarden.

Bij het testen van de iteratieve methode bleek het handig om inderdaad een convergentiever snellende methode toe te passen. Deze methode bewerkstelligt tevens dat het stelsel vergelijkingen nooit singulier wordt, ook niet als de hele bodem verzadigd is. Dus het oplossen van dit stelsel geeft nooit meer problemen.

De correctie bestaat het vermenigvuldigen van een aantal coëfficiënten van Δh_i^{j+1} in het linkerlid van vergelijking (20) met een term $(1+\epsilon)$.

Vergelijking (20) wordt hiermee aangepast tot:

$$\begin{aligned}
 & V_i C_i^{j+1,m-1} \frac{\Delta h_i^{j+1,m}}{\Delta t} - r_1 \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} (\Delta h_{i+1}^{j+1,m} - (1+\epsilon) \Delta h_i^{j+1,m}) + r_1 \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} ((1+\epsilon) \Delta h_i^{j+1,m} - \Delta h_{i-1}^{j+1,m}) \\
 & = -V_i \frac{\theta_i^{j+1,m-1} - \theta_i^j}{\Delta t} + \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} [r_1 h_{i+1}^{j+1,m-1} + (1-r_1) h_{i+1}^j - r_1 h_i^{j+1,m-1} - (1-r_1) h_i^j + \Delta z_{i+\frac{1}{2}}] \\
 & \quad - \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+r_1,m-1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} [r_1 h_i^{j+1,m-1} + (1-r_1) h_i^j - r_1 h_{i-1}^{j+1,m-1} - (1-r_1) h_{i-1}^j + \Delta z_{i-\frac{1}{2}}] \\
 & \quad + S_i^{j+r_2,m-1}
 \end{aligned} \tag{37}$$

De tweede aanpassing van het stelsel betreft het geval met twee fluxrandvoorwaarden. Bij de predictor-corrector methode (zie appendix G) werd in alle gevallen met twee fluxrandvoorwaarden de beneden randvoorwaarde omgezet in een drukrandvoorwaarde. Bij de numerieke oplossing van het instationaire probleem met twee fluxranden is het omzetten van een fluxrand in een drukrand eigenlijk niet nodig, behalve voor het geval dat de bodem volledig verzadigd is. In de iteratieve methode wordt daarom alleen in deze specifieke situatie de bovenfluxrand omgezet in een drukrand. Er is gekozen om in dat geval een bovendrukrand van 1 cm op te geven op $z=0$. Na aanpassing van deze randvoorwaarde is het stelsel weer eenduidig oplosbaar.

Vergelijking met de predictor-corrector methode

Een aantal belangrijke verschillen met de predictor-corrector uit Appendix G zijn:

- Ten eerste, de nieuw voorgestelde methode is iteratief en zal veelal meer dan 2 iteraties per tijdstap nodig hebben. Bij vergelijking met de predictor-corrector

methode moet hiermee rekening gehouden worden.

- Een belangrijk verschil met de predictor-corrector methode is dat de vochtgehalten direkt (impliciet) worden meegenomen in de iteratiemethode. In de predictor-corrector methode werden ze achteraf (expliciet) bepaald, op basis van de fluxen en het vorige vochtgehalte. Hierdoor kunnen kleine afwijkingen bij het bepalen van de fluxen aanleiding geven tot over- of onderschrijding van respectievelijk maximum en minimum vochtgehalte ('moisture content errors'). In de iteratieve methode zijn moisture content errors niet mogelijk, omdat bij de berekende drukken direct het vochtgehalte bepaald wordt, en niet meer achteraf via de fluxen.
- De iteratieve methode is volledig impliciet. De bepaling van K , C en Θ -waarden is onderdeel van de iteraties. Ook de randvoorwaarden zijn onderdeel van het stelsel en worden in het stelsel meegenomen, in plaats van expliciet opgelegd.
- De formulering van het stelsel lineaire vergelijkingen is uitgedrukt in Δh in plaats van h .
Op zich zou het stelsel ook goed in termen van h kunnen worden uitgedrukt, maar het gebruik van de Δh formulering biedt de mogelijkheid om, indien noodzakelijk, convergentieversnellingen aan het linkerlid toe te voegen zonder dat de uiteindelijke oplossing verandert.
- Het stelsel (11) hangt niet meer af van de bepaling van C . Uit (20) blijkt echter dat deze factor wel dat C voor het convergentiegedrag van het schema van belang is. Het is dus nog steeds belangrijk om de waarde van C redelijk nauwkeurig te bepalen.

4 Testen numerieke oplosmethode

4.1 Inleiding

Bij het testen is op de volgende zaken gelet:

1. Verloop in tijd en ruimte van vochtspanning, flux en vochtgehalte
2. Verschillen veroorzaakt door tijdstaplengthe en segmentlengthe
3. Optreden van ongewenste afwijkingen zoals:
 - a. Numerieke instabiliteiten ("flutter")
 - b. Over- en onderschrijdingen in vochtgehalte ("content")
 - c. Consistentie profiel vochtspanning-vochtgehalte ("profile")

Ad. 1. Verloop in tijd en ruimte van vochtspanning, flux en vochtgehalte

Hier gaat het om vragen als:

1. Hebben de resulterende profielen in tijd en ruimte een realistisch verloop?
2. Is de uiteindelijke oplossing geloofwaardig?
3. Hoe lang duurt het om een nieuw vochtprofiel in te laten stellen?

Ad. 2. Verschillen veroorzaakt door tijdstaplengthe en segmentlengthe

Wat is de invloed op de oplossing van de segmentlengthe en de tijdstaplengthe. Tot welke segment- en tijdstaplengthe kun je gaan en toch dezelfde oplossing overhouden?

Ad. 3. Optreden van ongewenste afwijkingen

Zoals in voorgaande hoofdstukken aangeduid is het mogelijk dat een aantal ongewenste afwijkingen kunnen optreden. Dit betreft de volgende mogelijkheden:

- a. Numerieke instabiliteiten ("flutter")

Flutter kan optreden als een deel van de oplossing zich afspeelt in de buurt van de "imaginaire" as. Flutter kan worden verminderd door een hogere waarde te kiezen bij de "theta-methode" (zie Appendix H).
- b. Over- of onderschrijdingen van vochtgehalte limieten ("content")

Het oplosalgoritme gaat ervan dat het nieuwe vochtgehalte kan worden uitgerekend aan de hand van de fluxen en het vorige vochtgehalte. Deze methode heeft als nadeel dat kleine afwijkingen bij het bepalen van de fluxen aanleiding kunnen geven tot een overschrijding van het maximaal mogelijke vochtgehalte (bij verzadiging) of van een onderschrijding van het minimaal mogelijke vochtgehalte (bij verwelking).

c. Consistentie profiel vochtspanning-vochtgehalte ("profile")

Het oplosalgoritme gaat ervan dat het nieuwe vochtgehalte kan worden uitgerekend aan de hand van de fluxen en het vorige vochtgehalte. Deze methode heeft als nadeel dat kleine afwijkingen bij het bepalen van de fluxen aanleiding kunnen geven tot een vochtgehalteprofiel dat niet in overeenstemming is met het vochtspanningsprofiel. Als de vochtspanning daalt dan moet het vochtgehalte ook dalen en omgekeerd.

4.2 Overzicht testprogramma

De te testen situaties worden hieronder beschreven. Voor het testen is een workbench ontwikkeld in Visual Basic. Hiermee kan een reeks van berekeningen worden uitgevoerd en geanalyseerd. In de huidige opzet kunnen de volgende variaties worden geanalyseerd:

1. Tijdstaplenkte
2. Opbouw profiel in horizonten en aantal segmenten per horizont
3. Beginvoorwaarde
4. Drainagefunctie

Afhankelijk van het aantal te analyseren waarden per onderdeel wordt bepaald hoeveel berekeningen er in één set kunnen zitten. Als er bijvoorbeeld vier tijdstaplenkten worden opgegeven, naast drie profielen, en twee drainagefuncties dan bestaat een complete set van mogelijke combinaties uit $4 \times 3 \times 2 = 24$ berekeningen.

Voor de grafische nabewerking is gebruik gemaakt van standaard WL programmatuur, dat wil zeggen JSPOST. Hiermee zijn grafieken te maken van zowel profielen in de tijd als de diepte, voor meerdere berekeningen. Een nadeel van JSPOST is dat het geen synchronisatie mogelijkheden kent. Hiermee wordt bedoeld dat in JSPOST gebruik gemaakt wordt van tijdstappen en geen rekening wordt gehouden met de tijdstaplenkte. Hetzelfde geldt in de diepte, waar JSPOST gebruik maakt van segmentnummers in plaats van de diepte. Hier dient bij de interpretatie van de grafieken rekening mee gehouden te worden.

Conform de offerte zijn de volgende sets doorgerekend:

- Set 1: Constante verdamping
- Set 2: Variabele neerslag
- Set 3: Storende laag en variabele neerslag
- Set 4: Staring reeks en drainagefuncties

De sets zijn zodanig opgezet dat de numerieke methode voor verschillende bodemtypen en voor diverse onder- en bovenrandvoorwaarden wordt getest. Bij de eerste drie testsets wordt met een vaste grondwaterstand (een drukrandvoorwaarde) gewerkt, en voor twee bodemtypes het profiel berekend bij diverse mogelijke bovenrandvoorwaarden. Doel van deze testsets is om te testen of het model de verschillende type bovenrandvoorwaarden goed afhandelt. Tevens is bij set 2 onderzocht hoe het model reageert op een plotselinge verandering van de grondwaterstand.

Set 4 is de meest ingewikkelde set, en omvat ook meer berekeningen dan de overige sets gezamenlijk. In set 4 is de onderrandvoorwaarde een fluxrandvoorwaarde; dit zal ook veelal

bij het gebruik in MOZART het geval zijn. Als bovenrandvoorwaarde zijn fluxrandvoorwaarden opgelegd, die een situatie weergeven van hevige neerslag afgewisseld met droge periodes. Ook is in deze set het effect van de drainagefuncties onderzocht. De set omvat berekeningen voor een realistische doorsnede van de voorkomende bodemtypen in Nederland.

4.3 Constante verdamping

De te beantwoorden vraag hier is hoe goed het model een verdampingsprofiel voorspelt. De doorgerekende set ziet er als volgt uit:

1. Bodemtype: B8 (homogene zandige bodem)
2. Hoogte totale profiel van 2 m
3. Beginvoorwaarde: hydrostatisch vochtprofiel met een grondwaterstand op -1.75 m.
4. Randvoorwaarden:
 - bovenkant: constante flux van 0.1 cm/dag
 - onderkant: drukhoogte van 25 cm op diepte van 2 m
5. Tijdstappen (in principe totaal 10 dagen, maar minimaal 20 tijdstappen):
 - 0.1
 - 0.2
 - 0.5
 - 1.0
 - 2.0 (dagen)
6. Aantal segmenten:
 - 10
 - 20
 - 30
7. Relaxatieparameters
 - $r_1 = 0.7$ (mate impliciteit berekeningsschema)
 - $\omega_1 = 0.2$
 - $\epsilon = 0.01$
 - maximum aantal iteraties = 50

Dit zijn 15 berekeningen (5 tijdstaplengten maal 3 segmentlengten). In onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van de geconstateerde problemen.

Tabel 4.1 Resultaten constante verdampingsflux

Lengte tijdstep (dagen)	Nummer profiel	Tijdstappen * Segmenten	% Instabiliteiten	% Onder- of overschrijding vochtgehalte	% Fouten in consistentie profiel
0.1	1	3000	0	0	0
0.1	2	2000	0	0	0
0.1	3	1000	0	0	0
0.2	1	1500	0	0	0
0.2	2	1000	0	0	0
0.2	3	500	0	0	0
0.5	1	600	0	0	0
0.5	2	400	0	0	0
0.5	3	200	0	0	0
1	1	600	0	0	0
1	2	400	0	0	0
1	3	200	0	0	0
2	1	600	0	0	0
2	2	400	0	0	0
2	3	200	0	0	0

Hierin zijn:

Profiel 01 Bouwsteen B8, 30 segmenten

Profiel 02 Bouwsteen B8, 20 segmenten

Profiel 03 Bouwsteen B8, 10 segmenten

De conclusies ten aanzien van deze set zijn:

1. Het verdampingsprofiel in een homogene bodem lijkt goed te worden gemodelleerd;
2. Het duurt zeer lang voordat er zich een verdampingsprofiel over de hele bodem instelt.

Zie ook appendix B voor een discussie over insteltijden;

3. Er komen nauwelijks numerieke problemen voor.
4. Het gemiddelde aantal iteraties is ongeveer 30 per tijdstap. Er is weinig variatie over de verschillende tijdstapgroottes en aantal segmenten, grotere tijdstappen vragen slechts een gering aantal extra iteraties per tijdstap.

5. De resultaten voor de verschillende tijdstapgroottes komen goed overeen. Ook de resultaten voor de verschillende discretisaties (10, 20 of 30 segmenten) zien er analoog uit.

In bijlage C is een selectie gemaakt van grafische weergave van de resultaten.

4.4 Variabele neerslag

De te beantwoorden vraag hier is hoe goed voorspelt het model een periode van hevige regenval en daarna droogte?

De doorgerkende set ziet er als volgt uit:

1. Bodemtype: B8 (homogene zandige bodem)
2. Hoogte totale profiel van 2 m
3. Beginvoorwaarde: hydrostatisch vochtprofiel met een grondwaterstand op -1.75 m.
4. Randvoorwaarden:
 - bovenkant:
 - van dag 0 tot dag 5: drukhoogte van 5 cm (laagje water)
 - van dag 5 tot einde berekening: verdampingsflux van 0.2 cm/dag
 - onderkant:
 - van dag 0 tot dag 8: drukhoogte van 25 cm op diepte van 2 m
 - van dag 8 tot dag 9: drukhoogte daalt tot 5 cm op diepte van 2 m
 - van dag 9 tot einde berekening: drukhoogte 5 cm op diepte van 2 m
5. Tijdstappen (in principe totaal 10 dagen, maar minimaal 20 tijdstappen):
 - 0.02
 - 0.05
 - 0.1
 - 0.2 (dagen)
6. Aantal segmenten:
 - 10
 - 20
 - 30
 - 40
 - 50
7. Relaxatieparameters:
 - $r_1 = 0.8$ (mate impliciteit berekeningsschema)
 - $\omega_1 = 0.2$
 - $\epsilon = 0.01$
 - maximum aantal iteraties = 250

Dit zijn 20 berekeningen (4 tijdstaplengten maal 5 segmentlengten). In onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van de resultaten.

Tabel 4.2 Resultaten variabele neerslag

Lengte tijdstep (dagen)	Nummer profiel	Tijdstappen * Segmenten	% Instabiliteiten	% Onder of overschrijdingen vochtgehalte	% Fouten in consistentie profiel
0.02	1	25000	1	0	0
0.02	2	20000	0	0	0
0.02	3	15000	1	0	0
0.02	4	10000	1	0	0
0.02	5	5000	1	0	0
0.05	1	10000	1	0	0
0.05	2	8000	1	0	0
0.05	3	6000	1	0	0
0.05	4	4000	0	0	0
0.05	5	2000	3	0	0
0.1	1	5000	1	0	0
0.1	2	4000	2	0	0
0.1	3	3000	1	0	0
0.1	4	2000	2	0	0
0.1	5	1000	2	0	0
0.2	1	2500	4	0	0
0.2	2	2000	4	0	0
0.2	3	1500	3	0	0
0.2	4	1000	2	0	0
0.2	5	500	4	0	0

Hierin zijn:

- Profiel 01 Bouwsteen B8, 50 segmenten
- Profiel 02 Bouwsteen B8, 40 segmenten
- Profiel 03 Bouwsteen B8, 30 segmenten
- Profiel 04 Bouwsteen B8, 20 segmenten
- Profiel 05 Bouwsteen B8, 10 segmenten

De conclusies ten aanzien van deze set zijn:

- 1 De potentiaal bovenrandvoorwaarde in deze homogene bodem geeft aanleiding tot numerieke instabiliteiten bij gebruik van grotere tijdstappen; daarom zijn bij deze testset kleinere tijdstappen gebruikt dan bij de verdampingset.
- 2 De insteltijden zijn veel korter, het instellen van een neerslagoverschot gaat veel sneller dan van een verdampingoverschot.
- 3 Het gemiddelde aantal iteraties bedraagt 25 per tijdstap. Dit is minder dan bij de verdampingstestset. Dit wordt veroorzaakt door het feit dat de bodem enkele dagen geheel verzadigd is, en overgang van verzadigd naar verzadigd (geen veranderingen dus) vereist slechts 1 of 2 iteraties.
- 4 Het opleggen van een randvoorwaarde die een profiel oplegt dat sterk afwijkt van het initiële profiel vereist kleinere tijdstappen en meer iteraties.
- 5 De plotselinge sprong in onderrandvoorwaarde (verandering grondwaterstand met 20 cm.) geeft nauwelijks aanleiding tot numerieke problemen.
- 6 Er komen meer numerieke problemen voor dan bij de verdampingsset. De problemen worden groter als er grotere tijdstappen gebruikt worden.
- 7 Voor een kleiner aantal segmenten treden ook sneller problemen op. Dit houdt verband met het criterium dat in hoofdstuk 3.3 is bepaald, namelijk dat er oscillaties voor kunnen komen als de stapgrootte (grootte van de segmenten) te groot wordt gekozen. Voor bodemtype B8 is daar afgeleid dat een stapgrootte van 4 cm voldoende is om oscillaties tegen te gaan. Bij een grotere stapgrootte gaat het niet per definitie fout, maar oscillaties kunnen niet uitgesloten worden. Bij de sommen met 10 en 20 segmenten blijken enkele oscillaties optreden, terwijl 30, 40 en 50 segmenten goed zijn, alhoewel die ook nog niet aan het criterium voldoen; dit onderstreept nog eens dat het criterium geen noodzakelijk voorwaarde aangeeft, maar slechts een voldoende voorwaarde.
- 8 In het geval oscillaties optreden, blijken deze vrij snel uit te dempen en convergeert de oplossing naar de oplossing die met fijnere discretisatie gevonden wordt.
- 9 Bij een verzadigde bodem met een initiële flux naar beneden gericht leidt een omschakeling naar een kleine verdampingsflux op de bovenrand met een drukrandvoorwaarde aan de onderrand tot een snelle daling van de grondwaterstand. De grondwaterstand zakt zeer snel terug naar het oude opgelegde niveau.

In bijlage D is een selectie gemaakt van grafische weergave van de resultaten.

4.5 Inhomogene bodem en variabele neerslag

De te beantwoorden vraag hier is hoe goed voorspelt het model een periode van hevige regenval en daarna droogte bij een profiel waarin zich een storende laag bevindt. De doorgerekende set ziet er als volgt uit:

1. Bodemopbouw:
 - bovenste laag: B8 = zandig, 100 cm dik
 - middelste laag: O13 = kleilig, 50 cm dik
 - onderste laag: O2 = zandig, 50 cm dik
2. Hoogte totale profiel van 2 m

3. Beginvoorwaarde: hydrostatisch vochtprofiel met een grondwaterstand op -1.75 m.
4. Randvoorwaarden:
 - bovenkant:
 - van dag 0 tot dag 5: drukhoogte van 5 cm (laagje water)
 - van dag 5 tot einde berekening: verdampingsflux van 0.2 cm/dag
 - onderkant:
 - van dag 0 tot dag 10: drukhoogte van 25 cm op diepte van 2 m
5. Tijdstappen (in principe totaal 10 dagen, maar minimaal 20 tijdstappen):
 - 0.02
 - 0.05
 - 0.1
 - 0.2 (dagen)
6. Aantal segmenten:
 - 10
 - 20
 - 30
 - 40
7. Relaxatieparameters:
 - $r_1 = 0.8$ (mate impliciteit berekeningsschema)
 - $\omega_1 = 0.2$
 - $\epsilon = 0.01$
 - maximum aantal iteraties = 250

Dit zijn 16 berekeningen (4 tijdstaplengten maal 4 segmentlengten). In tabel 4.3. op de volgende pagina wordt een overzicht gegeven van de geconstateerde problemen.

De conclusies ten aanzien van deze set zijn:

- 1 De potentiaal bovenrandvoorwaarde in deze inhomogene bodem geeft aanleiding tot numerieke instabiliteiten bij gebruik van grotere tijdstappen; daarom zijn bij deze testset kleinere tijdstappen gebruikt dan bij de verdampingset.
- 2 De insteltijden zijn veel korter, het instellen van een neerslagoverschot gaat veel sneller dan van een verdampingsoverschot.
- 3 Het gemiddelde aantal iteraties bedraagt 80 per tijdstap. Dit is duidelijk meer dan bij de soortgelijke set voor een homogene bodem. Dit wordt vermoedelijk veroorzaakt doordat bij de hier gekozen inhomogene bodem de tweede laag beter doorlatend is dan de bovenste laag; de bodem wordt niet geheel verzadigd bij de onderdrukrandvoorwaarde van 25 cm. Bij een onderfluxrandvoorwaarde van 0, of bij het omwisselen van de bodemlagen, wordt de bodem wel verzadigd.
- 4 Verder geeft een grotere tijdstap hier sneller numerieke problemen dan bij de homogene bodem. De combinatie van grotere tijdstap en een kleiner aantal segmenten leidt tot de grootste problemen. Dit houdt vermoedelijk ook verband met het volgende punt, ook al wordt daarmee nog niet verklaard waarom een tijdstap van 0.1 dag in sommige gevallen slechter blijkt te gaan dan met een tijdstap van 0.2 dag.
- 5 Voor een kleiner aantal segmenten treden ook sneller problemen op. Dit houdt verband

met het criterium dat in hoofdstuk 3.3 is bepaald, namelijk dat er oscillaties voor kunnen komen als de stapgrootte (grootte van de segmenten) te groot wordt gekozen. Gelet op het criterium voor bodemtype O13 zou zelfs een nog fijnere schematisatie genomen kunnen worden.

In bijlage E is een selectie gemaakt van grafische weergave van de resultaten.

Tabel 4.3 Resultaten variabele neerslag met inhomogene bodem

Lengte tijdstep	Nummer profiel	Tijdstappen * Segmenten	% Instabiliteiten	% Onder- of overschrijding vochtgehalten	% Fouten in consistentie profiel
0.02	1	20000	0	0	0
0.02	2	15000	0	0	0
0.02	3	10000	1	0	0
0.02	4	5000	1	0	0
0.05	1	8000	1	0	0
0.05	2	6000	1	0	0
0.05	3	4000	2	0	0
0.05	4	2000	3	0	0
0.1	1	4000	14	0	0
0.1	2	3000	14	0	0
0.1	3	2000	23	0	0
0.1	4	1000	4	0	0
0.2	1	2000	38	0	0
0.2	2	1500	20	0	0
0.2	3	1000	18	0	0
0.2	4	500	6	0	0

Hierin zijn:

- Profiel 01 Bouwstenen B8, O13, O2; 40 segmenten
- Profiel 02 Bouwstenen B8, O13, O2; 30 segmenten
- Profiel 03 Bouwstenen B8, O13, O2; 20 segmenten
- Profiel 04 Bouwstenen B8, O13, O2; 10 segmenten

4.6 Staring reeks en drainagefuncties

De te beantwoorden vraag hier is of het model bij alle bodems uit de Staring reeks tot goede resultaten komt.

1. Bodemopbouw:
 - 21 profielen, opgebouwd volgens de Staringreeks (P01 t/m P21)
2. Hoogte totale profiel van 2 meter
3. Beginvoorwaarde: hydrostatisch vochtprofiel met een grondwaterstand op -1.00 m.
4. Randvoorwaarden:
 - bovenkant:
 - van dag 0 tot dag 1: neerslag van 5 cm/dag
 - van dag 1.1 tot dag 3: verdampingsflux van 0.2 cm/dag
 - van dag 3.1 tot dag 4: neerslag van 3 cm/dag
 - van dag 4.1 tot dag 10: verdampingsflux van 0.2 cm/dag
 - onderkant:
 - van dag 0 tot einde berekening: onderrandflux van nul.
5. Tijdstappen (in totaal 10 dagen):
 - 0.05
6. Aantal segmenten:
 - 20
 - 40
7. Drainagefuncties (2 verschillende)
 - D01: sterke drainage
 - boven de -30 cm intensiteit 0.5 cm/dag
 - boven de -100 cm intensiteit .05 cm/dag
 - beneden de -100 cm intensiteit -.03 cm/dag (infiltratie)
 - D02: zwakke drainage
 - boven de -100 cm intensiteit .005 cm/dag
 - beneden de -100 cm intensiteit -.003 cm/dag (infiltratie)
8. Relaxatieparameters
 - $r_1 = 0.7$ (mate impliciteit berekeningsschema)
 - $\omega_1 = 0.2$
 - $\epsilon = 0.01$
 - maximum aantal iteraties = 250

Dit zijn 84 berekeningen (21 profielen * 2 discretisaties * 2 drainagefuncties). In onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van de geconstateerde problemen.

Tabel 4.4 Resultaten Staring reeks en drainageprofielen, 20 segmenten

Lengte tijdstep (0.05 dag)	Nummer Profiel	Nummer drainage functie	Tijdstappen * Segmenten	% Instabiliteiten	% Onder- of overschrijding vochtgehalte	% Fouten in consistentie profiel
1	1	1	4000	2	0	0
1	1	2	4000	2	0	0
1	2	1	4000	0	0	0
1	2	2	4000	0	0	0
1	3	1	4000	3	0	0
1	3	2	4000	3	0	0
1	4	1	4000	2	0	0
1	4	2	4000	2	0	0
1	5	1	4000	0	0	0
1	5	2	4000	0	0	0
1	6	1	4000	4	0	0
1	6	2	4000	2	0	0
1	7	1	4000	1	0	0
1	7	2	4000	0	0	0
1	8	1	4000	0	0	0
1	8	2	4000	0	0	0
1	9	1	4000	0	0	0
1	9	2	4000	0	0	0
1	10	1	4000	0	0	0
1	10	2	4000	0	0	0
1	11	1	4000	0	0	0
1	11	2	4000	0	0	0
1	12	1	4000	0	0	0
1	12	2	4000	0	0	0
1	13	1	4000	0	0	0
1	13	2	4000	0	0	0
1	14	1	4000	0	0	0
1	14	2	4000	0	0	0

1	15	1	4000	0	0	0
1	15	2	4000	1	0	0
1	16	1	4000	1	0	0
1	16	2	4000	1	0	0
1	17	1	4000	4	0	0
1	17	2	4000	4	0	0
1	18	1	4000	3	0	0
1	18	2	4000	3	0	0
1	19	1	4000	0	0	0
1	19	2	4000	1	0	0
1	20	1	4000	0	0	0
1	20	2	4000	1	0	0
1	21	1	4000	1	0	0
1	21	2	4000	3	0	0

Tabel 4.5 Resultaten Staringreeks en drainagefuncties, 40 segmenten

Lengte tijdstap (0.05 dag)	Nummer Profiel	Nummer drainage functie	Tijdstappen * Segmenten	% Instabiliteiten	% Onder- of overschrijding vochtgehalte	% Fouten in consistentie profiel
1	1	1	8000	1	0	0
1	1	2	8000	1	0	0
1	2	1	8000	0	0	0
1	2	2	8000	0	0	0
1	3	1	8000	2	0	0
1	3	2	8000	2	0	0
1	4	1	8000	1	0	0
1	4	2	8000	0	0	0
1	5	1	8000	0	0	0
1	5	2	8000	1	0	0
1	6	1	8000	1	0	0
1	6	2	8000	0	0	0

1	7	1	8000	0	0	0
1	7	2	8000	0	0	0
1	8	1	8000	0	0	0
1	8	2	8000	0	0	0
1	9	1	8000	0	0	0
1	9	2	8000	0	0	0
1	10	1	8000	0	0	0
1	10	2	8000	0	0	0
1	11	1	8000	0	0	0
1	11	2	8000	0	0	0
1	12	1	8000	0	0	0
1	12	2	8000	0	0	0
1	13	1	8000	1	0	0
1	13	2	8000	0	0	0
1	14	1	8000	0	0	0
1	14	2	8000	0	0	0
1	15	1	8000	0	0	0
1	15	2	8000	1	0	0
1	16	1	8000	1	0	0
1	16	2	8000	1	0	0
1	17	1	8000	1	0	0
1	17	2	8000	1	0	0
1	18	1	8000	1	0	0
1	18	2	8000	1	0	0
1	19	1	8000	0	0	0
1	19	2	8000	1	0	0
1	20	1	8000	0	0	0
1	20	2	8000		0	0
1	21	1	8000		0	0
1	21	2	8000		0	0

In Bijlage F is opgenomen uit welke bouwstenen de profielen zijn opgebouwd,

De conclusies ten aanzien van deze set zijn:

- 1 De meeste profielen worden redelijk doorgerekend. De meeste numerieke problemen komen voor bij profielen 1, 3, 4, 6, 16, 17, 18 en 21. De numerieke problemen worden minder bij een fijnere discretisatie; zie ook conclusie 4.
- 2 Bij de zwakke drainagefunctie treden meer numerieke problemen op dan bij de sterke drainagefunctie. Op het eerste gezicht lijkt het weliswaar weinig verschil te maken maar bij het in meer detail (grafisch) bekijken van de resultaten blijken de gevallen met zwakke drainagefunctie toch meer instabiliteiten te vertonen.
3. Bij het analyseren van de resultaten voor verschillende bodemprofielen blijkt het volgende voor het geval van 20 segmenten (zie ook de plaatjes in bijlage F):
 - profiel nummer 10, een typische zandbodem (codes B2,O2,O5) geeft goede resultaten.
 - profiel nummer 16, een lichte kleibodem, geeft instabiliteiten.
 - profiel nummer 17, een zware kleibodem, geeft ook instabiliteiten.Profiel 16 en 17 komen veel voor; een fijnere discretisatie is voor deze bodemtypes noodzakelijk zoals in de volgende conclusie wordt aangegeven.
4. Bij gebruik van een fijnere discretisatie (40 segmenten in plaats van 20) worden de numerieke problemen minder; er treden minder oscillaties op. Voor sommige bodems is een nog fijnere discretisatie vereist. Voor de lichte kleibodem blijken er bij een schematisatie van 80 segmenten geen problemen meer te zijn, terwijl de resultaten voor 20 en 40 segmenten nog niet goed zijn, getuige de oscillaties in dag 0-1 en dag 3-4, en de grondwaterstanden. Dit is in overeenstemming met het criterium, dat voor bodemtype B10 een stapgrootte van orde 2 cm aanbeveelt. Mogelijk dat ook relaxeren van de brontermen nog verbetering brengt.
5. Voor het geval met 20 segmenten, profiel 16 is nog een vergelijking gemaakt met de predictor-corrector methode. Hierbij is een tijdstap van 0.001 dag gekozen, zodat het totaal aantal iteraties vergelijkbaar was met de iteratieve methode. Hiervoor bleek dat er bij de predictor-corrector methode veel meer instabiliteiten voorkwamen dan bij de iteratieve methode. Gezien het feit dat de resultaten van de iteratieve methode voor deze bodem nog niet geheel naar wens zijn, zou deze test ook nog voor een ander geval of voor een fijnere discretisatie uitgevoerd kunnen worden. Voorlopige conclusie is dat de iteratieve methode een betere performance heeft dan de predictor-corrector methode.

In bijlage F is een selectie gemaakt van grafische weergave van de resultaten.

5 Conclusies en aanbevelingen

In de hoofdstukken 2 en 3 is nader ingegaan op de wiskundige aspecten van de vergelijking. Hieruit blijkt dat er aantal problemen een rol kunnen spelen:

- numerieke instabiliteiten, die onderdrukt moeten kunnen worden met de theta-methode;
- rond de grondwaterstand kun je de problemen verwachten omdat de differentiaalvergelijking daar van karakter veranderd;
- bij zwakke drainagefuncties mag je eerder numerieke problemen verwachten; en
- gezien het karakter van de differentiaalvergelijking is een impliciete formulering van de drainagefuncties af te raden.

Voor de oplossing van de vergelijking zijn twee methoden onderzocht, namelijk de predictor-corrector methode en een iteratieve methode. De volledig impliciete iteratieve methode heeft een betere performance dan de predictor-corrector methode.

De conclusies ten aanzien van de testberekeningen met constante verdamping zijn:

- 1 Het verdampingsprofiel in een homogene bodem wordt goed gemodelleerd;
- 2 Het duurt zeer lang voordat er zich een verdampingsprofiel over de hele bodem instelt. Zie ook appendix B voor een discussie over insteltijden;
- 3 Er komen nauwelijks numerieke problemen voor.
- 4 Het gemiddelde aantal iteraties is ongeveer 30 per tijdstap. Er is weinig variatie over de verschillende tijdstapgroottes en aantal segmenten.
- 5 De resultaten voor de verschillende tijdstapgroottes komen goed overeen. Ook de resultaten voor de verschillende discretisaties (10, 20 of 30 segmenten) zien er analoog uit.

De conclusies ten aanzien van de testberekeningen met een variabele neerslag zijn:

- 1 De potentiaal bovenrandvoorwaarde in (in)homogene bodem geeft direct aanleiding tot het gebruik van kleinere rekentijdstappen, om numerieke instabiliteiten te voorkomen.
- 2 De insteltijden zijn veel korter, het instellen van een neerslagoverschot gaat veel sneller dan van een verdampingsoverschot.
- 3 Bij een verzadigde bodem met een initiële flux naar beneden gericht leidt een omschakeling naar een kleine verdampingsflux op de bovenrand met een drukrandvoorwaarde aan de onderrand tot een snelle daling van de grondwaterstand. De grondwaterstand zakt zeer snel terug naar het oude opgelegde niveau.
- 4 De plotselinge sprong in onderrandvoorwaarde (verandering grondwaterstand met 20

cm in 1 dag) geeft nauwelijks aanleiding tot numerieke problemen.

- 5 Bij de bepaling van het aantal segmenten moet rekening worden gehouden met het criterium voor oscillaties. Bij gebruik van een klein aantal segmenten zijn er eerder problemen te verwachten.
- 6 Bij een inhomogene bodem komen meer numerieke problemen voor dan bij een homogene bodem.
- 7 In het geval oscillaties optreden, blijken deze vrij snel uit te dempen en convergeert de oplossing naar de oplossing die met fijnere discretisatie gevonden wordt.

De conclusies ten aanzien van de testberekeningen met alle Staringprofielen zijn:

- 1 Alle profielen worden redelijk doorgerekend. De meeste numerieke problemen komen voor bij profielen 1, 3, 4, 6, 17, 18 en 21 bij grote segmentgroottes.
- 2 Bij de zwakke drainagefunctie treden meer numerieke problemen op dan bij de sterke drainagefunctie.
- 3 Bij gebruik van een fijnere discretisatie worden de numerieke problemen minder; er treden minder oscillaties op. Sommige bodems vereisen een fijne discretisatie. Voor de veel voorkomende profielen 16 en 17 (kleibodems) bijvoorbeeld moet een fijnere discretisatie genomen worden dan voor de profiel 10 (een zandbodem). Dit is in overeenstemming met het criterium genoemd in hoofdstuk 3.3. Mogelijk dat ook relaxeren van de brontermen nog verbetering brengt.
- 4 In het geval oscillaties optreden, blijken deze vrij snel uit te dempen en convergeert de oplossing naar de oplossing die met fijnere discretisatie gevonden wordt.

Aanbevelingen voor verder onderzoek

Verdere verbeteringen die zeer de moeite waard zijn van nader onderzoek:

- Source termen

Source termen zijn in het testprogramma nog niet van relaxatietermen voorzien zoals hierboven aangegeven (vergelijking 38-42); Het gebruik van relaxatie voor de source termen zou de resultaten van testset 3 mogelijk nog kunnen verbeteren.

- Variabele rekentijdstap.

De grootte van de tijdstap die gekozen wordt zou afhankelijk van de situatie ingesteld moeten worden door het model. Het blijkt uit de testsets dat bij een initieel hydrostatisch profiel met kleine verdampingsflux met grote tijdstappen kan worden gerekend, terwijl bij een bovendrukrandvoorwaarde op een onverzadigd profiel met veel

kleinere tijdstappen moet worden gerekend. In het algemeen geldt: als de randvoorwaarden slechts kleine afwijkingen van het initiële profiel veroorzaken kan met een grote tijdstap worden gerekend, terwijl in het geval van grote afwijkingen veroorzakende randvoorwaarden met kleinere tijdstappen moet worden gerekend.

Er is dus veel rekentijd te winnen door het model de rekentijdstap zelf in te laten stellen afhankelijk van de initiële situatie en de randvoorwaarden. Wat in welke situatie mogelijk is zou nader onderzocht moeten worden.

- Variabele segmentgrootte

Behalve met een variabele tijdstap kan wellicht ook met een variabele segmentgrootte over de tijd worden gerekend; in de literatuur staat dit bekend onder de term 'adaptieve roosters'. Dit vereist uiteraard de nodige voorzichtigheid. Er moet in ieder geval massabehoudend worden gerekend, en mogelijk dat de uitvoer voor kwaliteitsberekeningen moet worden omgezet naar vaste segmentgroottes. Voor de situatie van een relatief droge bodem en randvoorwaarden die dit niet snel veranderen kan met relatief grote segmenten worden gerekend. Dit blijkt uit de testset met een constante verdamping. Bij de andere testsets waar de bodem tegen verzadiging wordt gebracht moet met meer en dus kleinere segmenten worden gerekend.

Anderzijds zijn de gevallen waar grotere segmentgroottes mogelijk zijn vaak ook de gevallen waar grote tijdstappen mogelijk zijn. Een eerste indruk is dat het slim laten bepalen van de rekentijdstap waarschijnlijk eenvoudiger is dan de segmenten variabel te laten zijn, maar dit moet geverifieerd worden.

- Keuze van de relaxatiecoëfficiënten

Tot dusver zijn alle sets gedraaid met vaste waarden voor de diverse relaxatiecoëfficiënten. Deze waarden zijn gekozen in een vroeg stadium van de tests. Bijvoorbeeld, voor de K en C waarden is steeds dezelfde ω waarde gebruikt; de brontermen worden nog niet in de ω -relaxatie meegenomen. Mogelijk dat verschillende waarden voor K en C betere resultaten geven. Nader onderzoek zou de gevoeligheid van de methode voor de verschillende parameters kunnen uitwijzen, en een set voorkeurswaarden kunnen opleveren.

- Onderzoek van convergentieversnellingen

Zoals hiervoor reeds beschreven is het stelsel vergelijkingen zodanig opgeschreven dat het geschikt is voor het gebruik van convergentieversnellende methoden.

Een zo'n dergelijke methode is reeds ingebouwd, namelijk het corrigeren van de diagonaalelementen van het stelsel. Hiervoor is gebruik gemaakt van een op te geven constante ϵ . Hiervoor is vooralsnog een waarde van 0.01 gekozen. De gekozen waarde is gerelateerd met andere intern gebruikte convergentiecriteria, zoals de maximale afwijking van de K-waarden en h-waarden in opeenvolgende iteraties.

- Verfijning van de flux- en vochtgehalte berekeningen

Bij het gekozen discretisatieschema blijken er, vooral bij kleine tijdstappen, fluctuaties in de fluxen voor te komen. Dit hangt samen met de interpretatie van het vochtgehalte. Als het vochtgehalte op het roosterpunt z_i nog niet verzadigd is, dan is het hele segment nog niet verzadigd. Als het roosterpunt z_i verzadigd is, dan is het hele segment ook verzadigd. Omdat het schema massabehoudend is betekent dit, dat bij een overgang van een segment van onverzadigd naar verzadigd, er een grote inkomende flux moet zijn in de betreffende tijdstap.

Dit effect wordt minder naarmate er de bodem is opgedeeld in meer segmenten. Meer segmenten betekent echter dat het stelsel vergelijkingen (20) of (28) dat opgelost moet worden groter wordt.

Een alternatieve methode is de bepaling van de term $V_i (\Theta_i^{j+1,m-1} - \Theta_i^j) / \Delta t$ te verfijnen, door gebruik te maken van schattingen van Θ op punten tussen de roosterpunten en de grenslagen, op basis van de drukken op de roosterpunten en de geschatte druk op de grenslagen. Deze methode bepaalt dan alleen het rechterlid van (11) of (28) op een aangepaste manier; de grootte van het stelsel vergelijkingen blijft hetzelfde, terwijl dan toch eenzelfde effect als het rekenen met meer segmenten wordt bewerkstelligd. Deze methode is niet in detail onderzocht, maar een eerste test gaf positieve resultaten. Dit zou nog verder uitgezocht moeten worden.

6 Literatuur

- Celia M.A., Bouloutas E.T., Zarba R. (1990)
A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation,
Water Resources Research, vol. 26, 1990, pp. 1483-1496
- Crank J. (1975)
Mathematics of diffusion
Clarendon Press, Oxford, 1975
- Floris F.J.T. (1991)
Two-phase flow of newtonian and non-newtonian fluids in a porous medium applied to water coning,
proefschrift TU Delft, november 1991
- Freeze R.A., Cherry J.A. (1979)
Groundwater
Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 1979
- Gerke H.H., Van Geuchten, M.T. (1993)
A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media,
Water Resources Research, vol. 29, no. 2, pp. 305-219
- Gilding B.H. (1983)
The soil-moisture zone in a physically-based hydrological model
Advances in Water Resources, vol 6, 1983, pp. 36-43
- Haverkamp R., Vauclin M., Touma J., Wieringa P.J., Vachaud G.
A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration
Soil Sci. Soc. Am. J., 1977, vol. 41, pp. 285-294
- Hoogendoorn, C.J. (1978)
Fysische transportverschijnselen II (diktaat)
Delftsche Uitgeversmaatschappij, 1978
- Hornung U., Messing W.
A predictor-corrector alternating-direction implicit method for two-dimensional unsteady saturated-unsaturated flow in porous media
Journal of Hydrology, vol. 47, 1980, pp. 317-323
- Kirkland M.R., Hills R.G., Wierenga P.J. (1992)
Algorithms for Solving Richards' Equation for Variably Saturated Soils
Water Resources Research, vol. 28, no. 8, pp. 2049-2058, August 1992
- Remson I., Hornberger G.M., Molz F.J. (1971)
Numerical Methods in Subsurface Hydrology,
with an introduction to the finite element method
Wiley-Interscience, 1971
- WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM (1988)
DELWAQ Manual (final draft)
WL, 1988
- WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM | RIZA (1993)
Definitiestudie MOZART
WL | RIZA, rapport T1131, 1993
- WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM (1994)
Afweging numerieke methoden in MOZART
WL, rapport T1131, 1994

Wösten J.H.M., Bannink M.H. Beuving J. (1986)

Waterretentie- en doorlatendheidskarakteristieken van boven- en ondergronden in Nederland: De Staringreeks
ICW, Wageningen, 1986, rapport 18

Appendix A Middelingsprocedure

Zoals in hoofdstuk 2 vermeld wordt de doorlatendheid op het grensvlak in een inhomogene bodem bepaald door harmonische middeling. Dit is ten dele empirisch bepaald, maar er is ook een goede rechtvaardiging te geven.

In principe wordt de doorlatendheid op het grensvlak bepaald uit de geschatte drukhoogte op het grensvlak, dat wil zeggen:

$$K_{i+\frac{1}{2}} = K(h_{i+\frac{1}{2}}) \quad (\text{A1})$$

Voor homogene bodems is de beste benadering voor de drukhoogte ter hoogte van het grensvlak een lineaire benadering:

$$K_{i+\frac{1}{2}} = K\left(\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})\right) \quad (\text{A2})$$

Echter, voor inhomogene bodems is die lineaire benadering niet goed. Daarom benaderen we de drukhoogte h en de afgeleide van h naar z op het grensvlak van twee kanten. Met h^* geven we de onbekende drukhoogte op het grensvlak aan.

Veronderstellen we dat de variatie van de doorlatendheid K over de roostercel ten gevolge van de verandering van bodemtype veel groter is dan die ten gevolge van de variatie van de drukhoogte, dan kunnen we K aan weerszijden van het grensvlak bij benadering constant veronderstellen. Omdat de grensvlakken precies halverwege de roosterpunten liggen, vinden we voor de benadering van de flux op het grensvlak de volgende uitdrukkingen: (zie ook figuur 2.2. en 2.3)

$$\begin{aligned} \phi_1 &= K_i \left(\frac{h^* - h_i}{\frac{1}{2}\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} + 1 \right) \\ \phi_2 &= K_{i+1} \left(\frac{h_{i+1} - h^*}{\frac{1}{2}\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} + 1 \right) \\ \phi_3 &= K^* \left(\frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} + 1 \right) \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

Uit de continuïteitseis volgt dat deze fluxen aan elkaar gelijk moeten zijn.

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \phi_2 \Rightarrow \\ (K_i + K_{i+1}) h^* &= K_{i+1} h_{i+1} + K_i h_i + \frac{1}{2} \Delta z_{i+\frac{1}{2}} (K_{i+1} - K_i) \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

Deze uitdrukking substitueren in de vergelijking voor ϕ_1 levert, na wat bewerkingen:

$$\phi_1 = \frac{K_i K_{i+1}}{\frac{1}{2} \Delta z_{i+\frac{1}{2}} (K_i + K_{i+1})} (h_{i+1} - h_i) + \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}} \quad (\text{A5})$$

Uit deze laatste formule is direct de vervangende doorlatendheid K^* te vinden:

$$K^* = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}} \quad (\text{A6})$$

Deze waarde is dus uitsluitend geldig voor een grensvlak met aan weerszijden verschillende type bodem.

Appendix B Insteltijd voor diffusieproblemen

Naar aanleiding van de bevindingen van de testruns met betrekking tot de insteltijd van de onverzadigde zone wordt hier een klassiek probleem behandeld waarvan de wiskundige beschrijving analoog is aan die van een bodem met constante eigenschappen (K en C constant): de indringing van warmte in een plaat met een eindige dikte.

De vergelijking:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (\text{B1})$$

waarin:

- c_p - warmtecapaciteit (bij constante druk)
- ρ - dichtheid van de stof
- λ - warmtegeleidingscoëfficiënt

In dit geval worden de coëfficiënten constant gekozen, zodat de bovenstaande vergelijking wat eenvoudiger wordt:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{B2})$$

De randvoorwaarden voor het probleem zijn:

$$\begin{aligned} t=0, 0 \leq x \leq L : \quad T &= 0 \\ t>0, x=-L \text{ en } x=L : \quad T &= T_0 \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

Dit kan eenvoudig worden opgelost met behulp van de methode van scheiding van variabelen (Hoogendoorn, 1978):

$$T = T_0 - T_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4}{\pi} \frac{(-1)^n}{(2n+1)} e^{-\frac{1}{4}(2n+1)^2 \pi^2 a t / L^2} \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi x / L\right) \quad (\text{B4})$$

Na wat langere tijd ($t > L^2/a$) is eigenlijk alleen de eerste term van de reeks nog van belang, zodat:

$$T \approx T_0 - T_0 \frac{4}{\pi} e^{-\frac{\pi^2 a t}{4L^2}} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \quad (\text{B5})$$

Hierin ziet men duidelijk dat de instelling van de evenwichtstemperatuur T_0 bepaald wordt door de grootte L^2/a .

Appendix C Resultaten van testset 1

De volgende pagina's tonen enkele grafische resultaten van de testberekeningen met constante verdamping. Hierin zijn de volgende notaties gebruikt:

Profielen:

- profiel 01 bestaat uit 30 segmenten;
- profiel 02 bestaat uit 20 segmenten;
- profiel 03 bestaat uit 10 segmenten;

Tijdstappen:

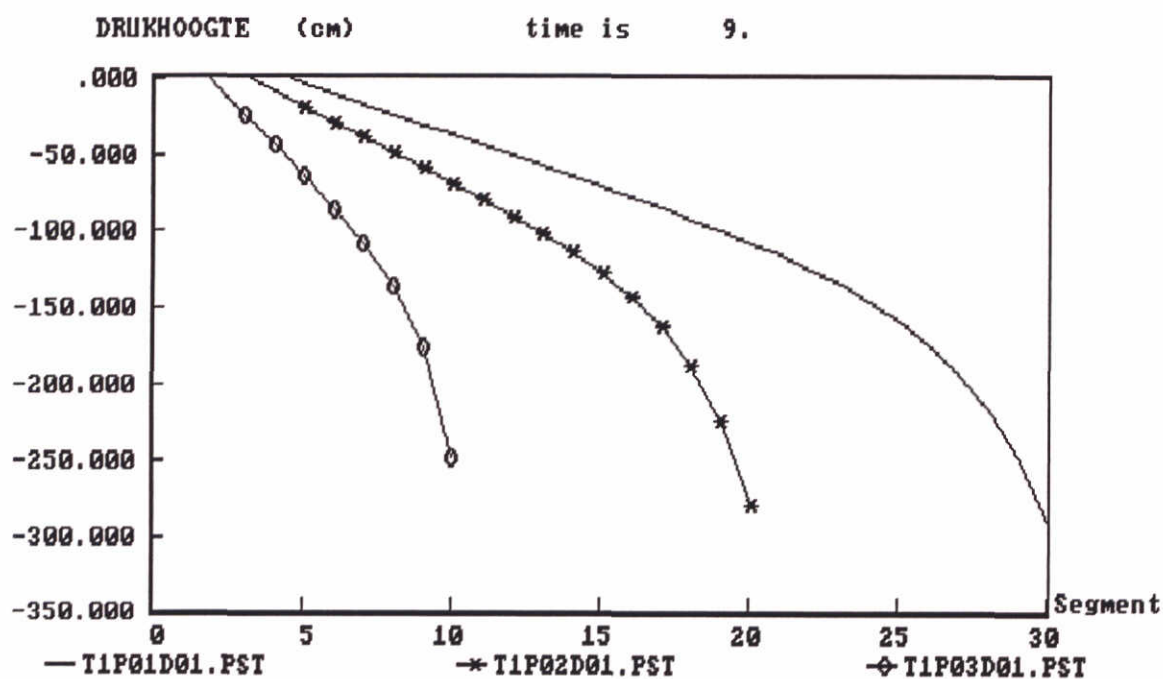
- T1 staat voor de kleinste tijdstap: 0.1 dag;
- T2 staat voor tijdstappen van 0.2 dag;
- T3 voor 0.5 dag;
- T4 voor 1.0 dag;
- T5 voor 2.0 dagen.

Code T1P01 staat dus voor de situatie met 30 segmenten, met tijdstappen van 0.1 dag.

Uit de grafieken blijkt dat de resultaten voor de verschillende tijdstapgroottes en aantallen segmenten goed overeenkomen.

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



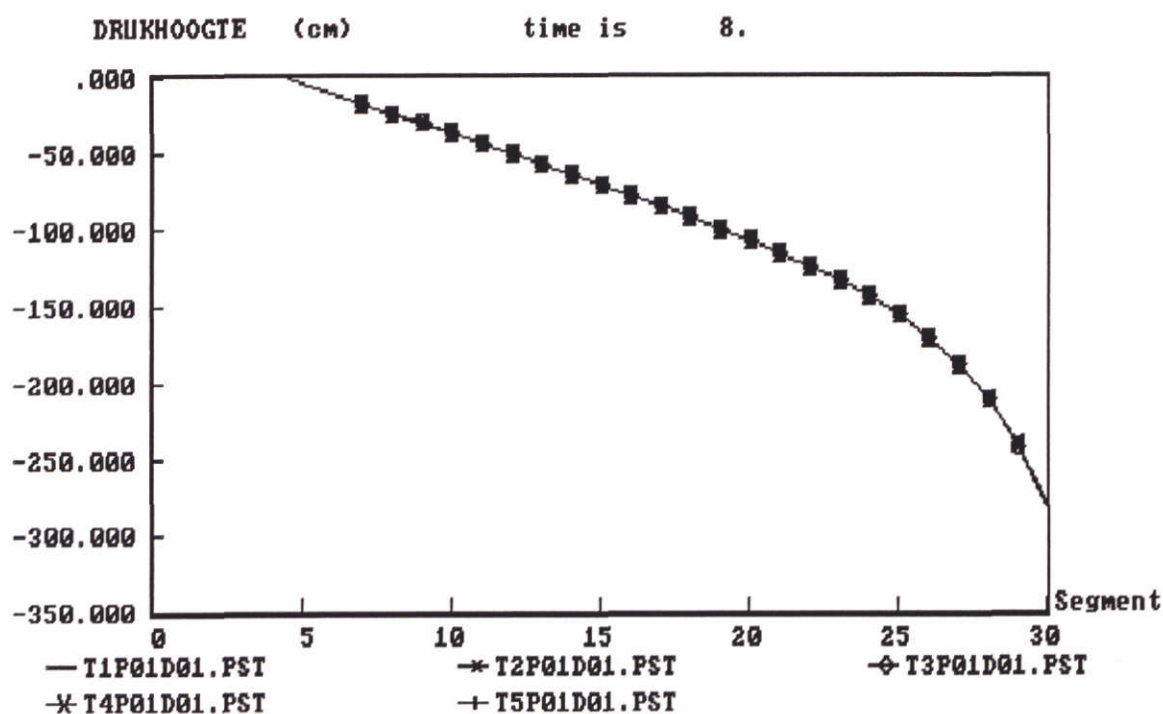
T1P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T1P02D01 = 20 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T1P03D01 = 10 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T2P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

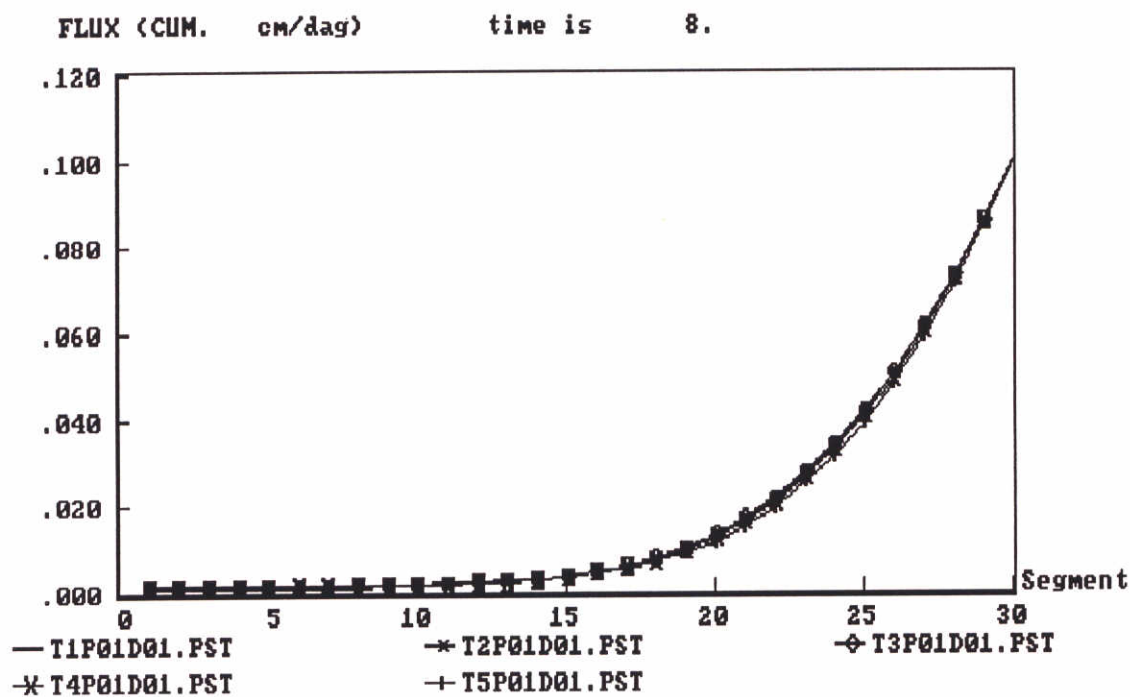
T3P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.5 dag

T4P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 1 dag

T5P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 2 dagen

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T2P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

T3P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.5 dag

T4P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 1 dag

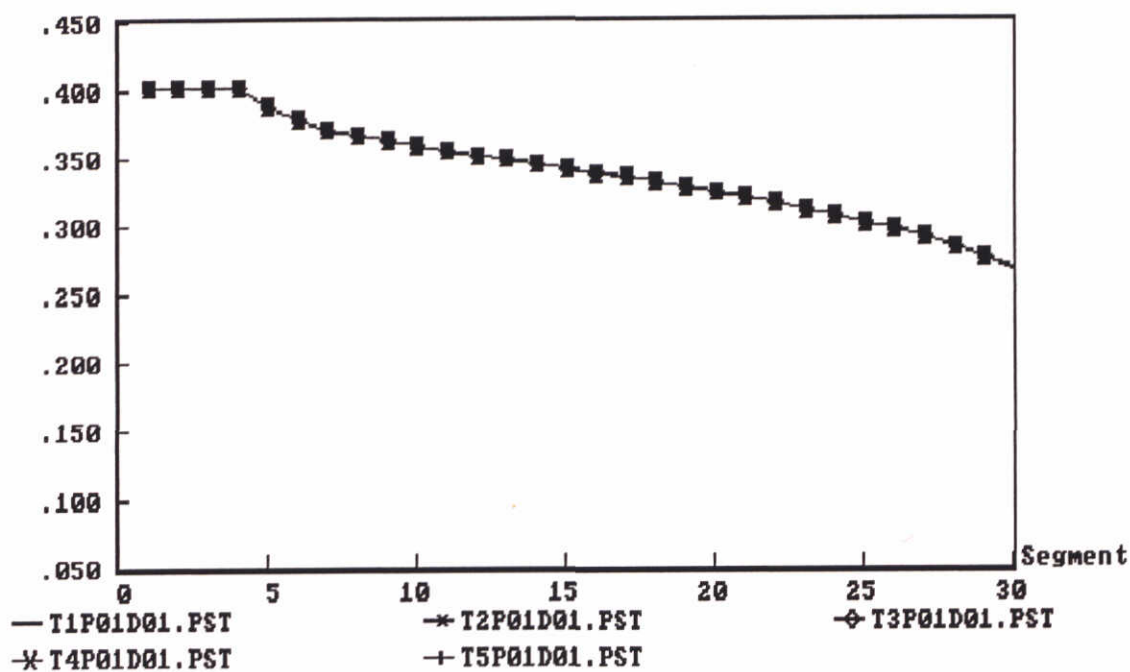
T5P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 2 dagen

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

VOCHTGEHAL te (-)

time is 8.



T1P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T2P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

T3P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 0.5 dag

T4P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 1 dag

T5P01D01 = 30 segmenten, tijdstapgrootte 2 dagen

Appendix D Resultaten van testset 2

De volgende pagina's tonen enkele grafische resultaten van de testberekeningen met variabele neerslag. Hierin zijn de volgende notaties gebruikt:

Profielen:

- profiel 01 bestaat uit 50 segmenten;
- profiel 02 bestaat uit 40 segmenten;
- profiel 03 bestaat uit 30 segmenten;
- profiel 04 bestaat uit 20 segmenten;
- profiel 05 bestaat uit 10 segmenten;

Tijdstappen:

- T1 staat voor de kleinste tijdstap: 0.02 dag;
- T2 staat voor tijdstappen van 0.05 dag;
- T3 staat voor 0.1 dag;
- T4 staat voor 0.2 dag.

Code T1P01 staat dus voor de situatie met 50 segmenten, met tijdstappen van 0.02 dag.

De eerste grafieken tonen resultaten voor profiel 1 (50 segmenten), voor verschillende tijdstapgroottes. Element 50 is de bovenste cel, direkt onder het maaiveld.

Het feit dat het drukverloop voor tijdstapgrootte T4 iets achter loopt bij de anderen, wordt veroorzaakt door de implementatie van de randvoorwaarden. De nieuwe bovenrandvoorwaarde wordt pas actief op $t=5.1$ dag; voor rekentijdstappen van 0.02, 0.05 en 0.1 is dat dus vanaf dat tijdstip, voor een rekentijdstap van 0.2 dag is dat pas vanaf $t=5.2$ dag.

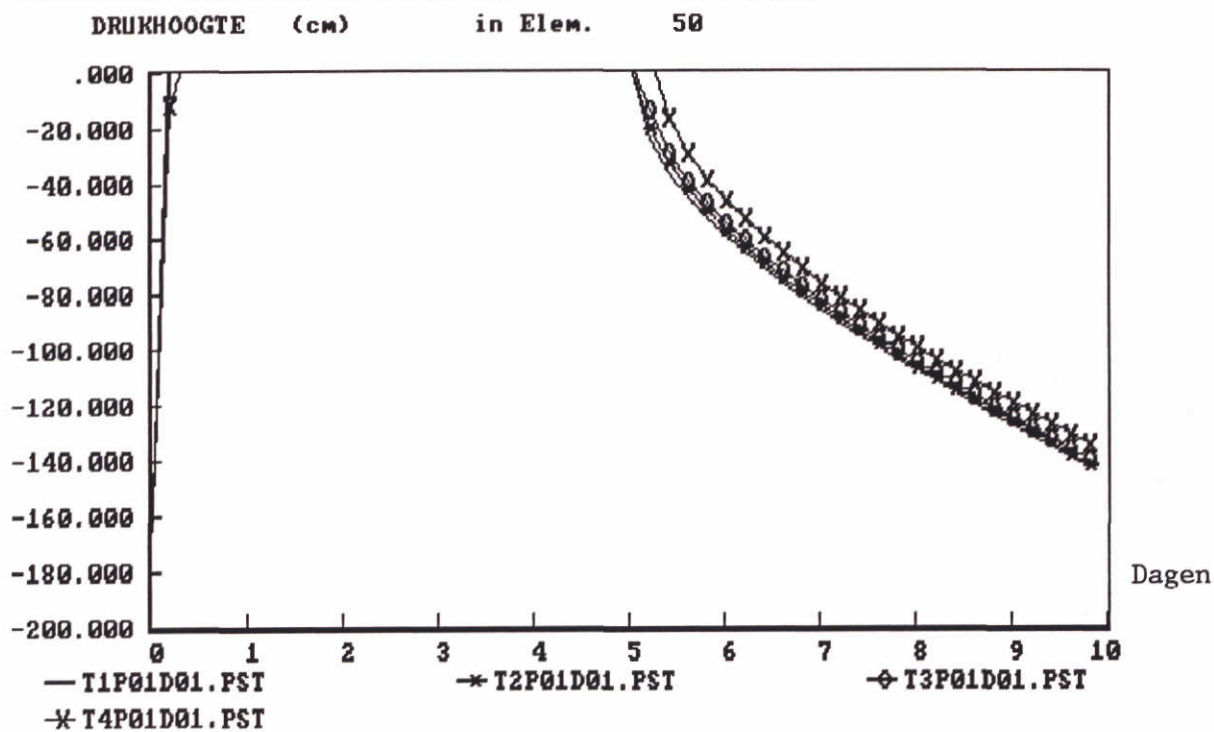
Hetzelfde geldt voor de diepte. In deze variabele wordt voor $t>0$ de grondwaterstand aangegeven, terwijl voor $t=0$ de z-coördinaat van het gekozen segment wordt gegeven.

Voor de drukhoogte is het verloop gegeven op $t=0.8$ en $t=1.2$ dag.

Voor de grootste rekentijdstap blijken er dan nog oscillaties te zijn, die echter snel uitdempenen.

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

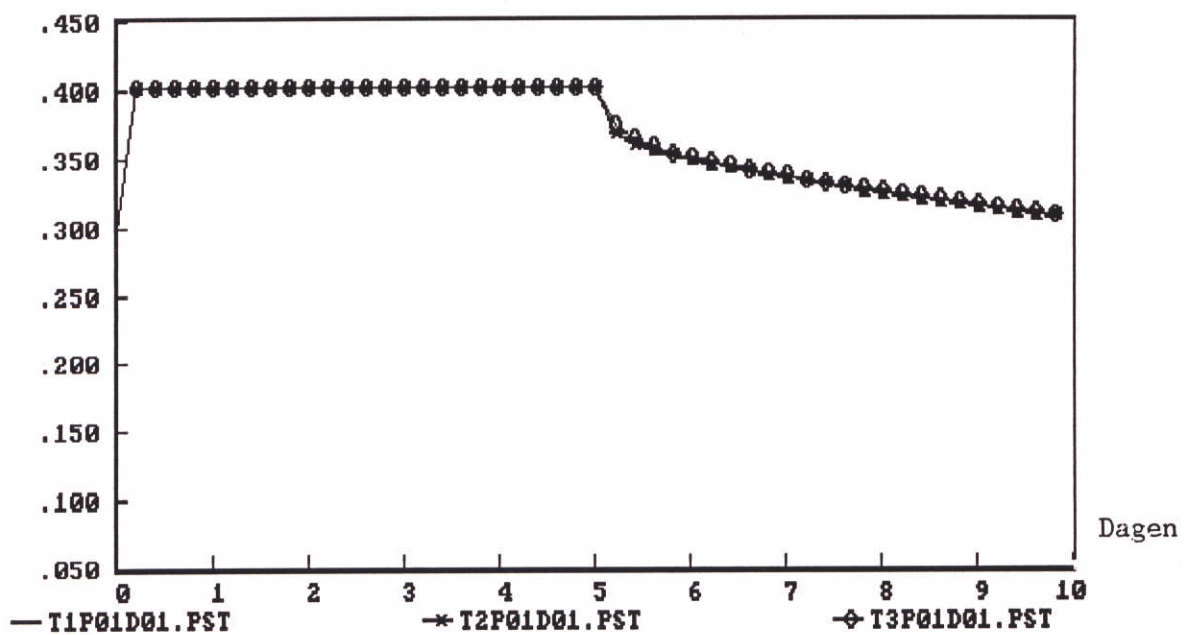
T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T4P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

VOCHTGEHAL te (-) in Elem. 50



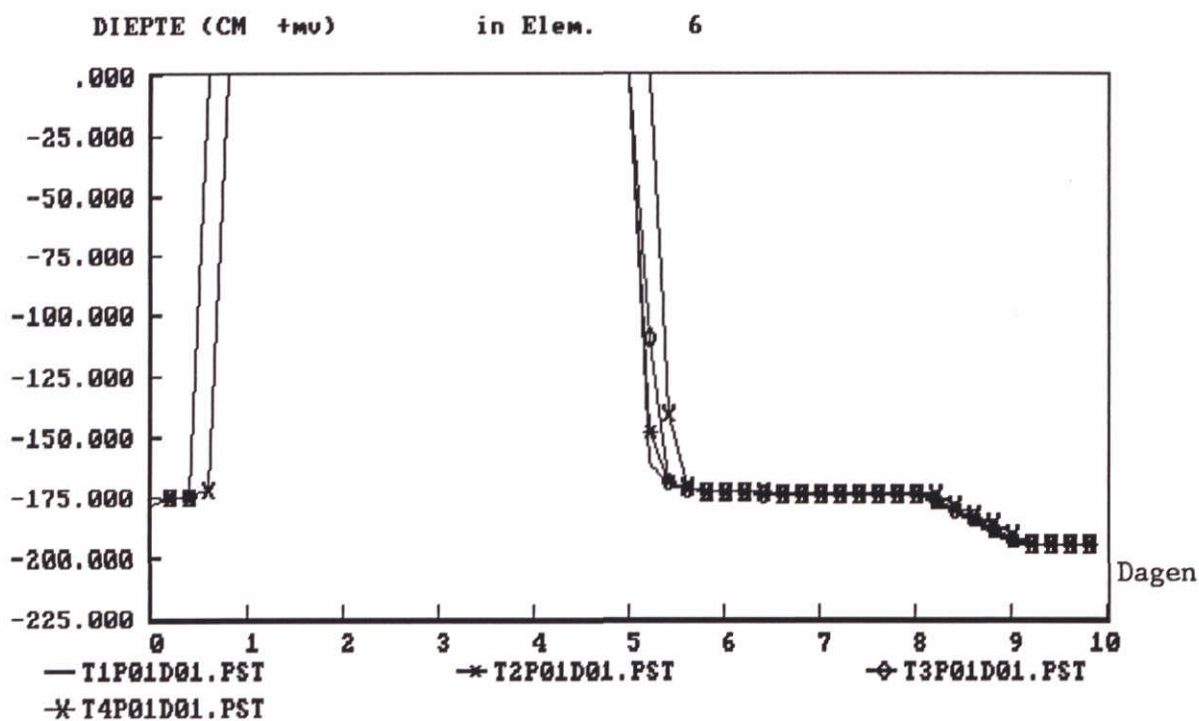
T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

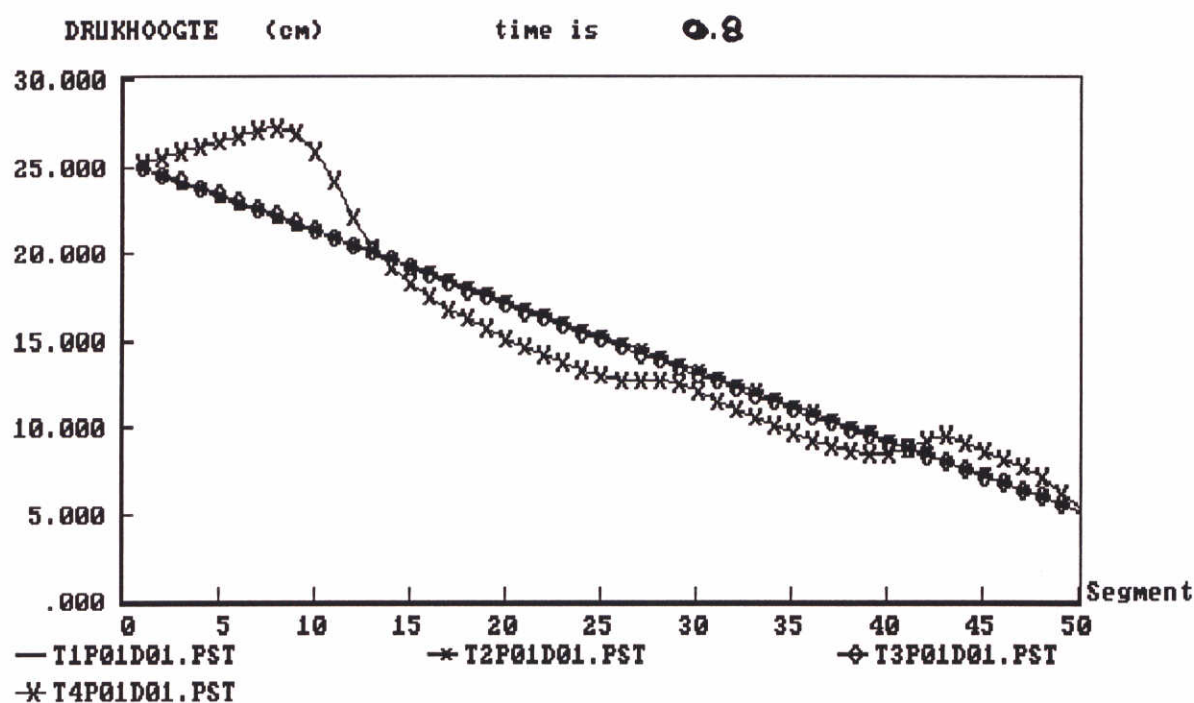
T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T4P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

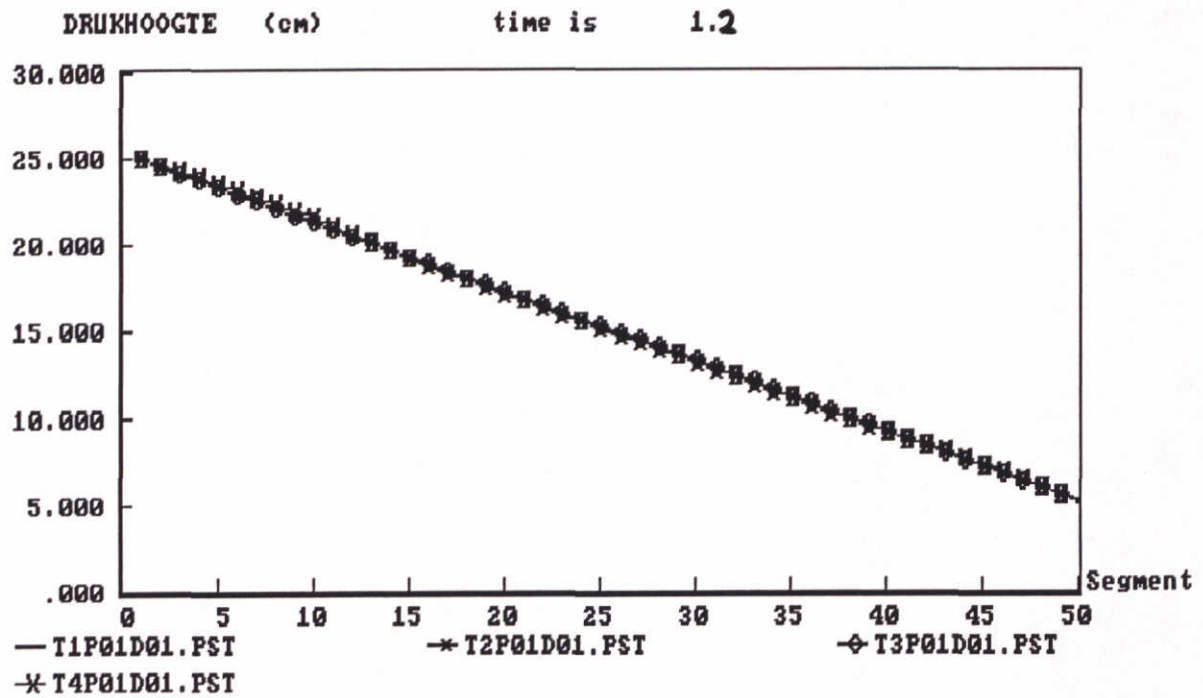
T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T4P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

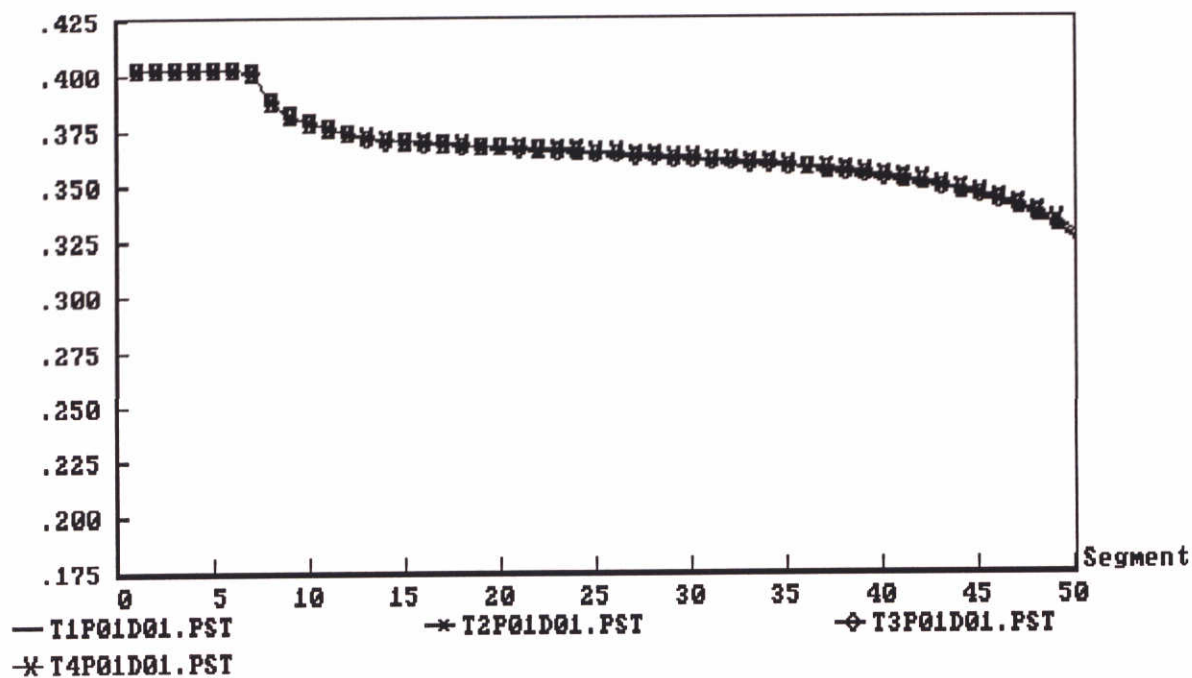
T4P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

VOCHTGEHAL te (-)

time is 8.



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

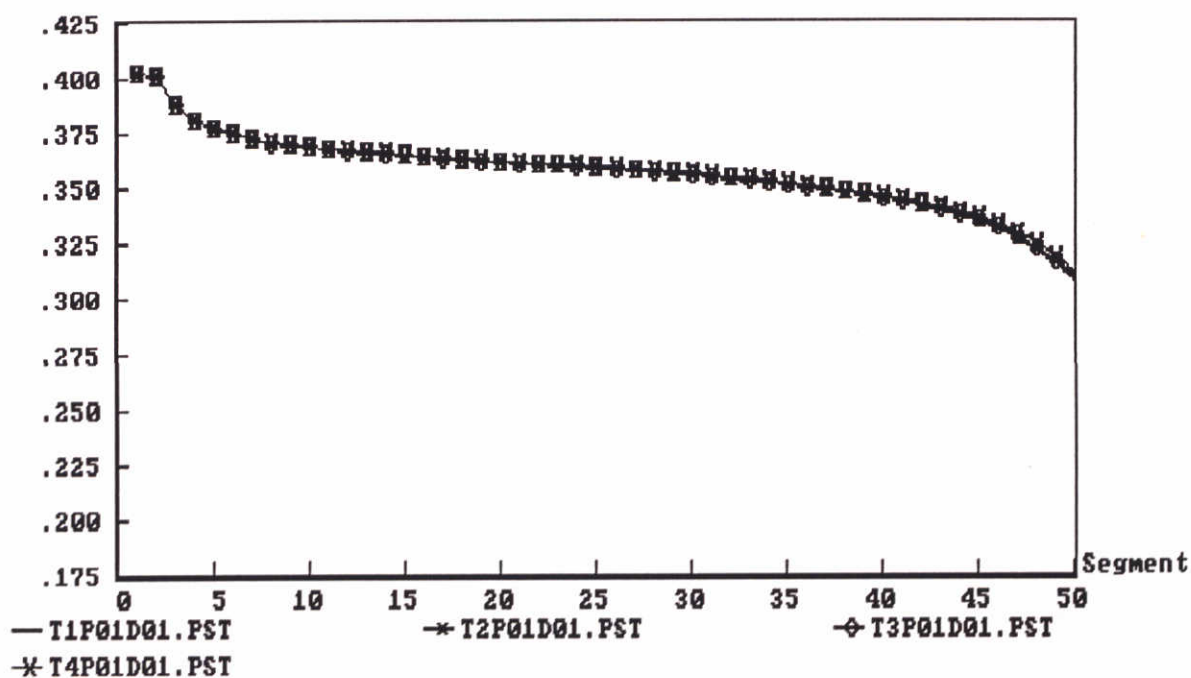
MOZART - prototype:

landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

VOCHTGEHAL te (-)

time is 10.



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

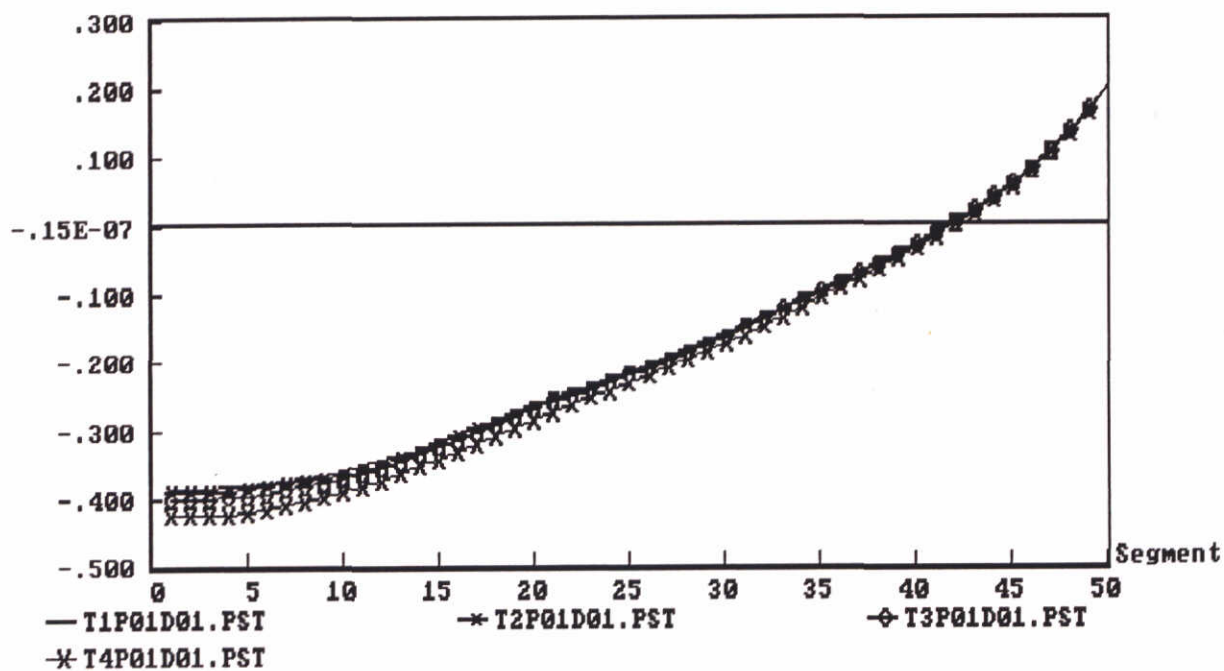
T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

FLUX (CUM. cm/dag) time is 10.



T1P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

T4P01D01 = 50 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

Appendix E Resultaten van testset 3

De volgende pagina's tonen enkele grafische resultaten van de testberekeningen met variabele neerslag op een inhomogene bodem. Hierin zijn de volgende notaties gebruikt:

Profielen:

- profiel 01 bestaat uit 40 segmenten;
- profiel 02 bestaat uit 30 segmenten;
- profiel 03 bestaat uit 20 segmenten;
- profiel 04 bestaat uit 10 segmenten;

Tijdstappen:

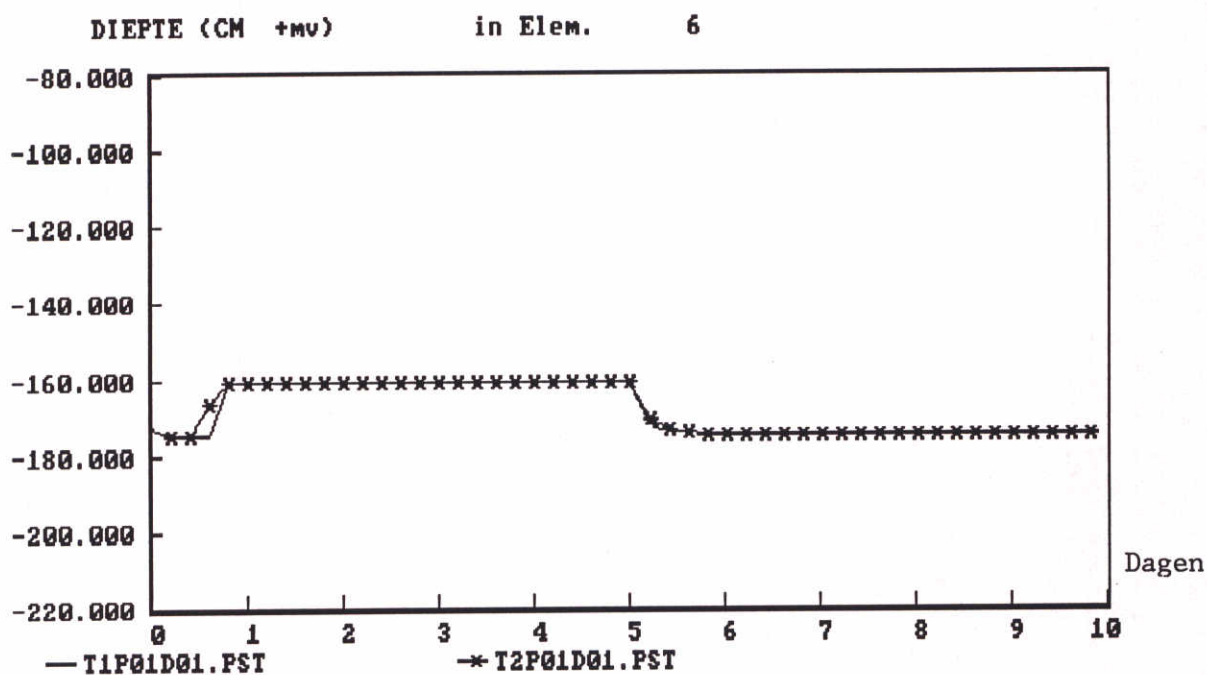
- T1 staat voor de kleinste tijdstap: 0.02 dag;
- T2 staat voor tijdstappen van 0.05 dag;
- T3 staat voor 0.1 dag;
- T4 staat voor 0.2 dag.

Code T1P01 staat dus voor de situatie met 40 segmenten, met tijdstappen van 0.02 dag.

De eerste grafieken tonen de grondwaterstand voor de verschillende runs met 40 segmenten. Bij kleine tijdstappen (T1 en T2) zijn er geen oscillaties, bij grotere tijdstappen wel (T3, T4). Dit is ook zichtbaar in de vochtgehalten en de fluxen na 5 dagen. Na 10 dagen zien de resultaten voor T1, T2 en T3 weer vrijwel hetzelfde uit.

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

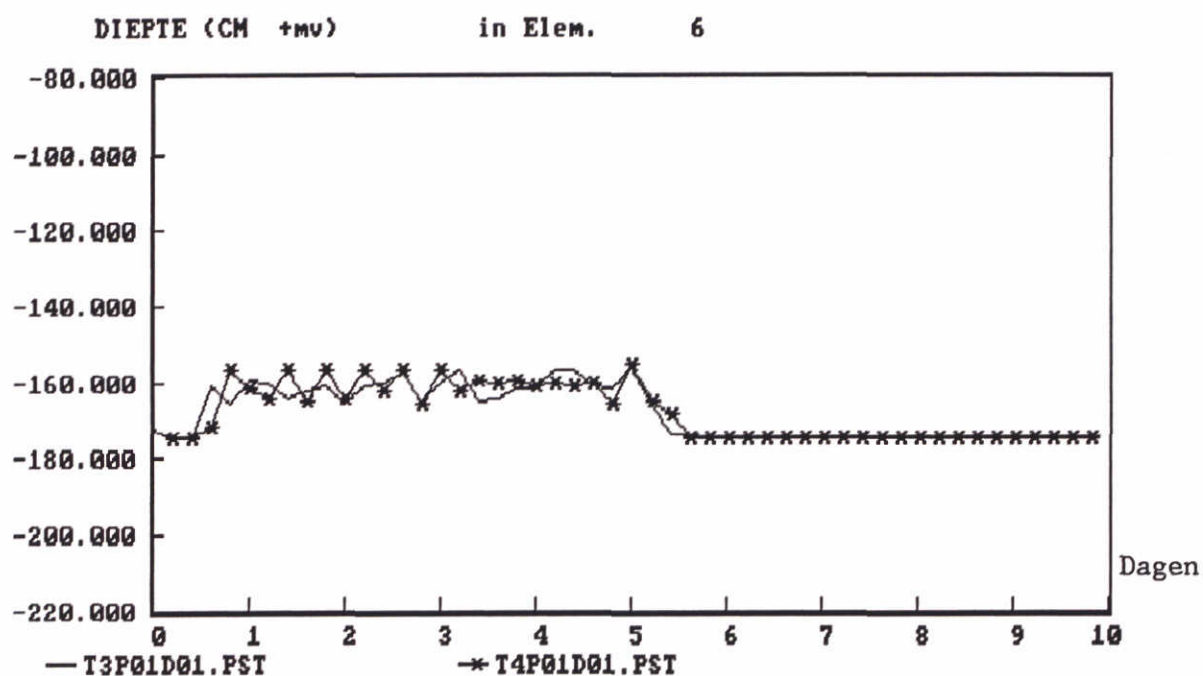


T1P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T3P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

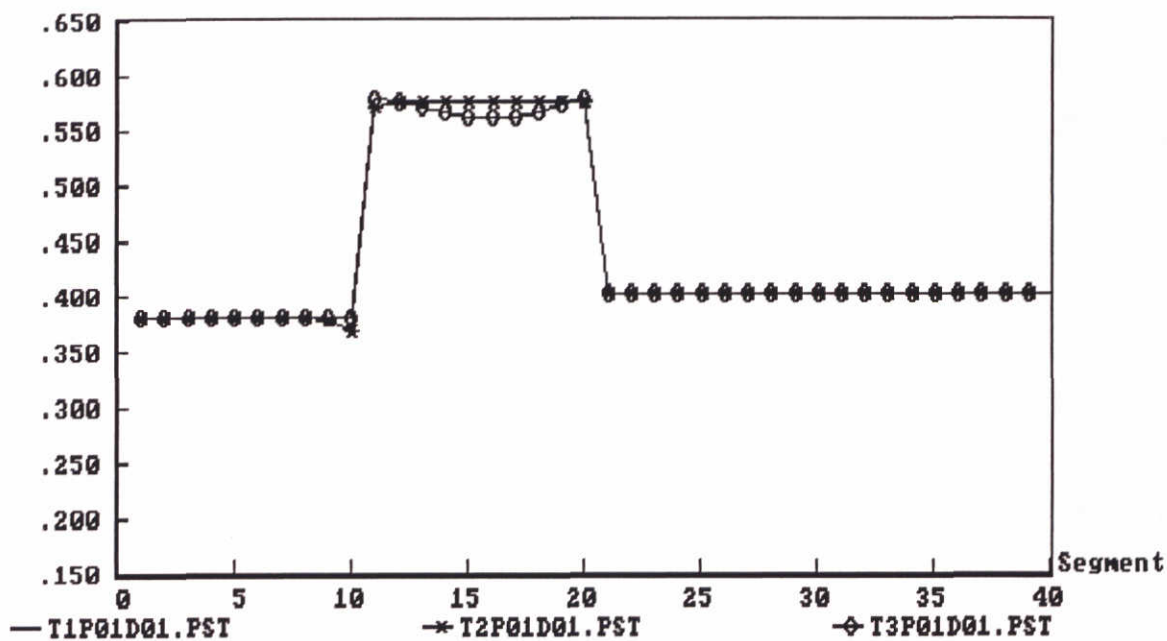
T4P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.2 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

VOCHTGEHAL te (-)

time is 5.



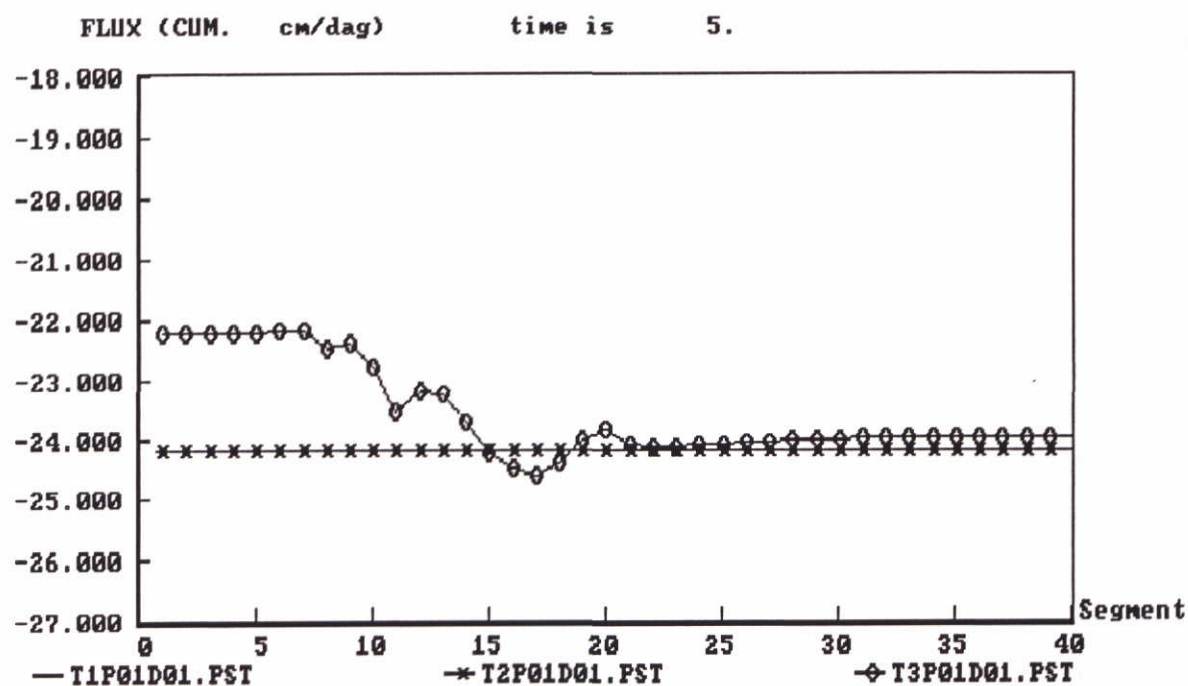
T1P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



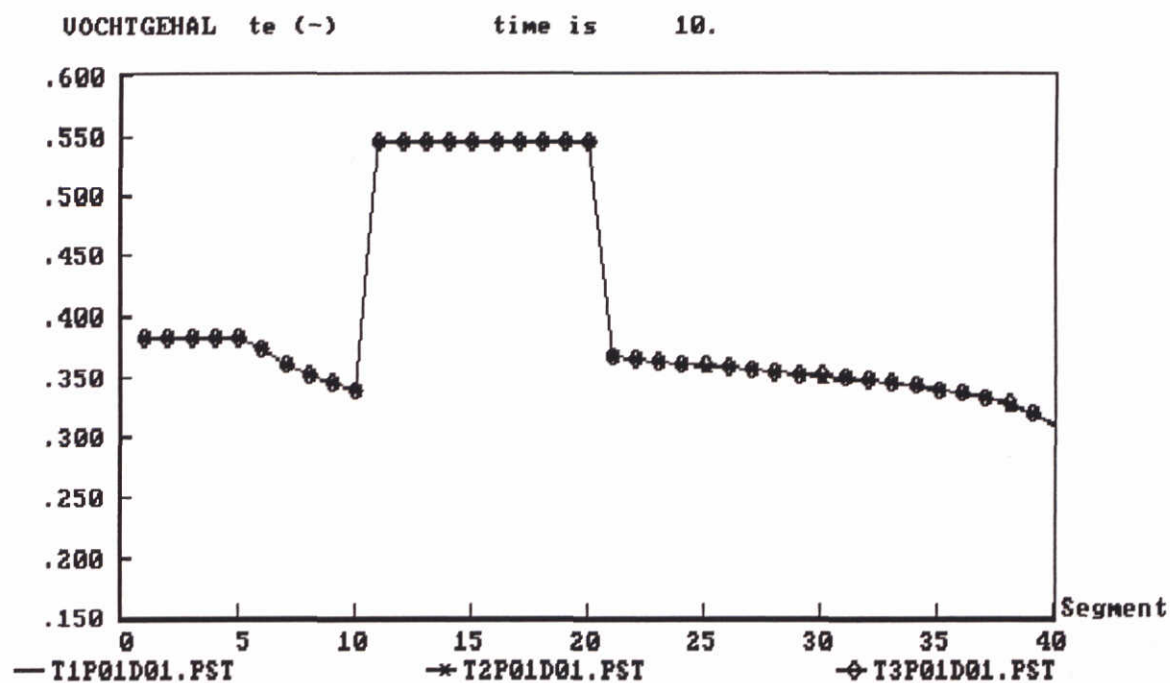
T1P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

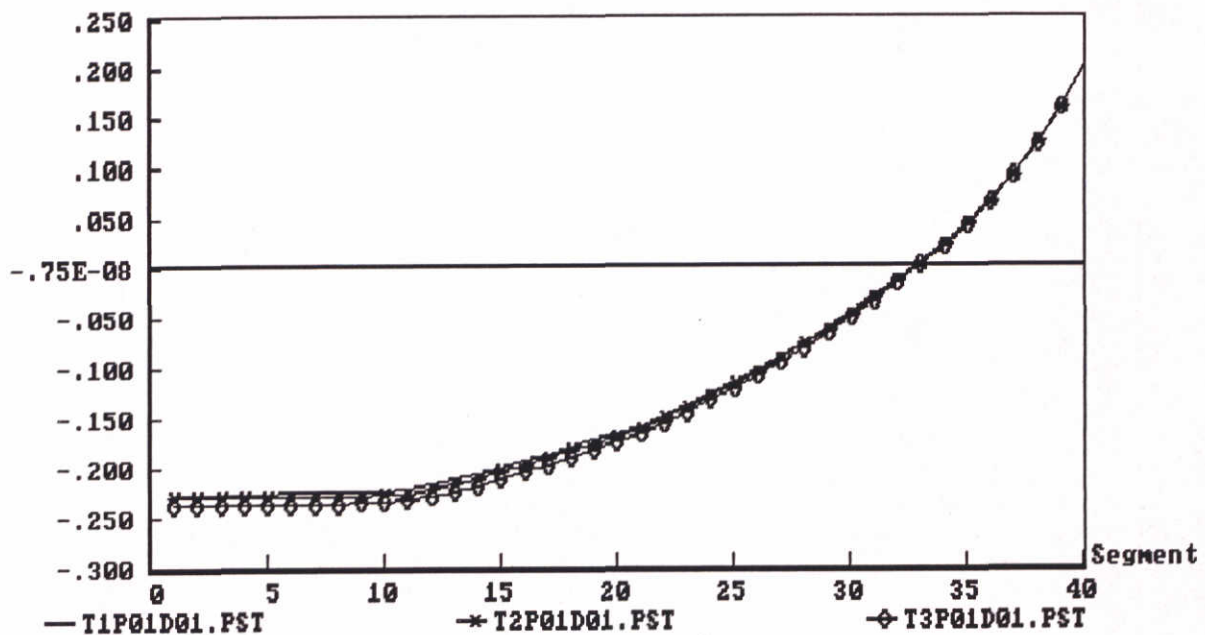
T2P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

FLUX (CUM. cm/dag) time is 10.



T1P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.02 dag

T2P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.05 dag

T3P01D01 = 40 segmenten, tijdstapgrootte 0.1 dag

Appendix F Resultaten van testset 4

Alvorens de resultaten van de testberekeningen met alle Staringreeks profielen te geven wordt eerst een kort overzicht van de verschillende profielen gegeven.

Tabel F.1. Beschrijving van de profielen

Tabel F.1. Beschrijving van de profielen

Nummer profiel	Eerste laag (bovenste)	Tweede laag	Derde laag (indien aanwezig)
1	B18, 40 cm	O17, 160 cm	
2	B16, 20 cm	O17, 50 cm	O2, 130 cm
3	B11, 40 cm	O17, 160 cm	
4	B11, 40 cm	O17, 40 cm	O2, 120 cm
5	B2, 20 cm	O17, 50 cm	O2, 130 cm
6	B18, 30 cm	O12, 170 cm	
7	O1, 200 cm		
8	B1, 30 cm	O1, 170 cm	
9	B2, 50 cm	O2, 150 cm	
10	B2, 50 cm	O2, 50 cm	O5, 100 cm
11	B3, 50 cm	O2, 40 cm	O6, 110 cm
12	B2, 90 cm	O2, 110 cm	
13	B3, 30 cm	O3, 20 cm	O2, 150 cm
14	B1, 20 cm	O5, 180 cm	
15	B8, 30 cm	O9, 170 cm	
16	B10, 30 cm	O10, 170 cm	
17	B12, 30 cm	O13, 170 cm	
18	B12, 30 cm	O13, 30 cm	O17, 140 cm
19	B8, 30 cm	O10, 30 cm	O2, 140 cm
20	B8, 30 cm	O10, 30 cm	O5, 140 cm
21	O15, 200 cm		

Tabel F.2. geeft de betekenis van de bodemcoderingen volgens Wösten e.a. (1986).

Tabel F.2. Betekenis van de bodemcodering

Bodemcodering (B=bovengrond, O=ondergrond)	Omschrijving
B1	Leemarm, zeer fijn tot matig fijn zand
B2	Zwak lemig, zeer fijn tot matig fijn zand
B3	Sterk lemig, zeer fijn tot matig fijn zand
B4	Zeer sterk lemig, zeer fijn tot matig fijn zand
B7	Zeer lichte zavel
B8	Matig lichte zavel
B10	Lichte klei
B11	Matig zware klei
B12	Zeer zware klei
B16	Zandig veen en veen
B18	Kleiig veen
O1	Leemarm, zeer fijn tot matig fijn zand
O2	Zwak lemig, zeer fijn tot matig fijn zand
O3	Sterk lemig, zeer fijn tot matig fijn zand
O4	Zeer sterk lemig, zeer fijn tot matig fijn zand
O5	Grof zand
O6	Keileem
O8	Zeer lichte zavel
O9	Matig lichte zavel
O10	Zware zavel
O11	Lichte klei
O12	Matig zware klei
O13	Zeer zware klei
O15	Siltige leem
O16	Oligotroof veen
O17	Mesotroof en eutroof veen

De volgende pagina's tonen enkele grafische resultaten van de testberekeningen met de Staringprofielen, voor profiel 10 en 16.

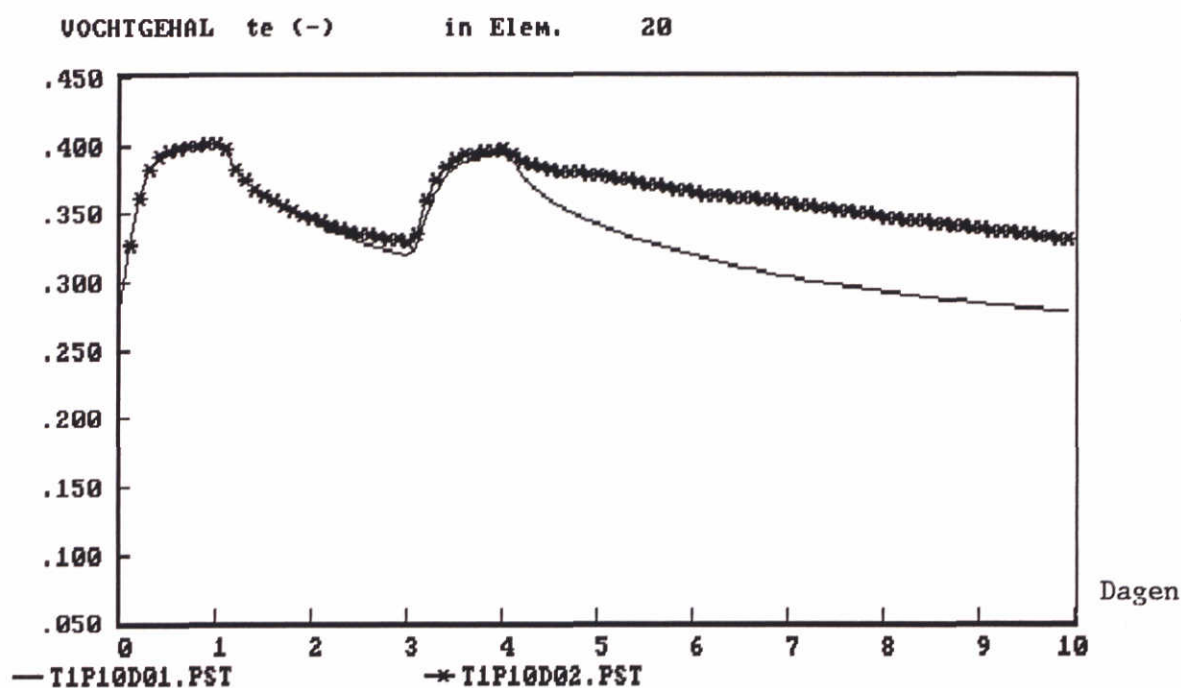
Allereerst worden 6 plaatjes voor het geval van 20 segmenten gegeven, daarna nog een aantal voor de sommen met 40 segmenten.

Vergelijking van profiel 10 voor de gevallen 20 en 40 segmenten geeft dat de resultaten als identiek te beschouwen zijn.

Profiel 16 geeft bij het geval van 20 segmenten oscillaties; in mindere mate doet zich dit ook nog bij 40 segmenten voor. Dit blijkt uit de vochtgehalten over de tijd van het bovenste segment. Dit werkt ook door in de grondwaterstand. Voor profiel 16 is ook nog eens een som gemaakt met 80 segmenten op een bodemdikte van 2 meter. Dan blijkt de oplossing vrij van oscillaties te zijn en ziet de grondwaterstand er ook goed uit.

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

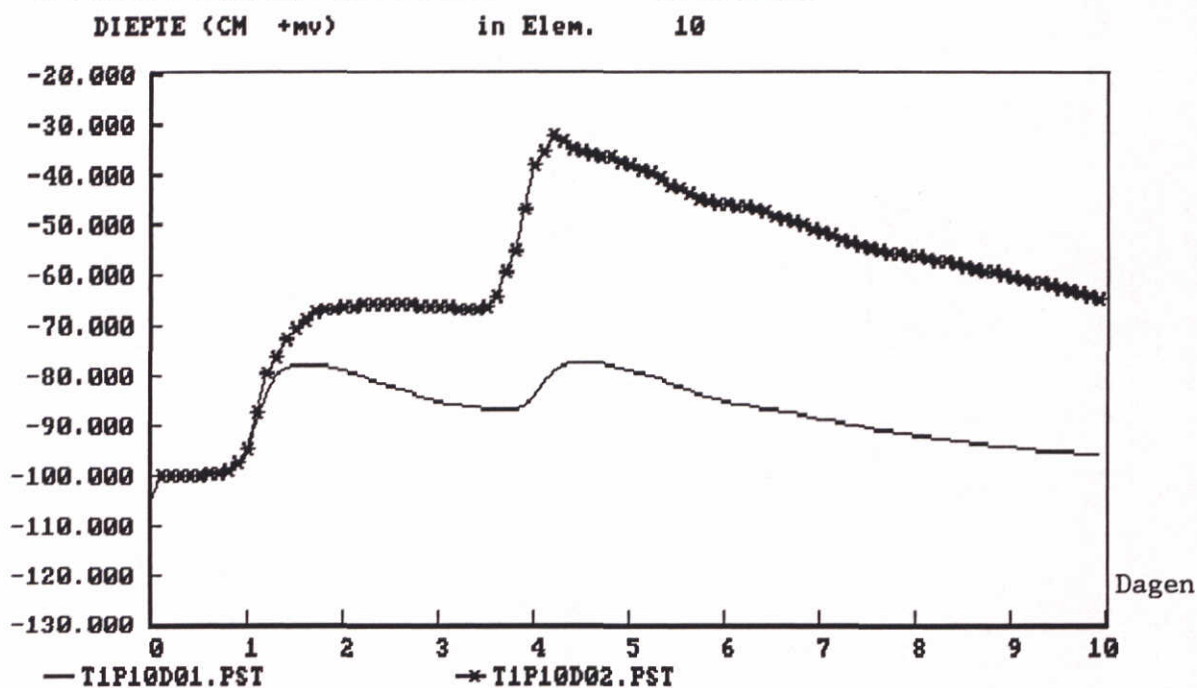


T1P10D01 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T2P10D02 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



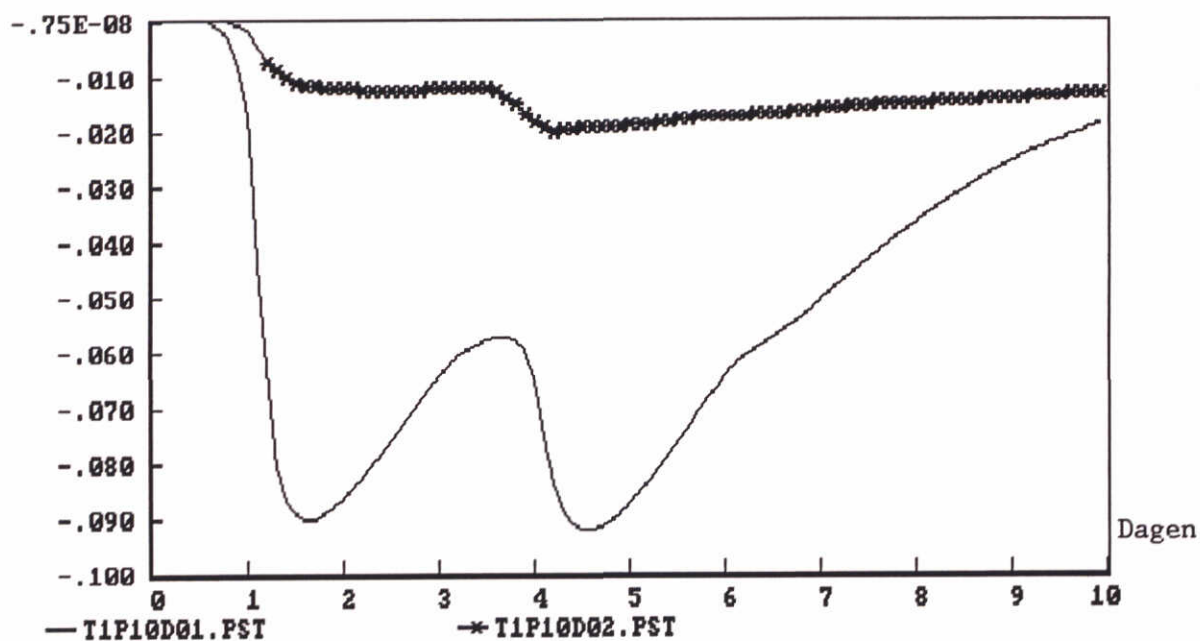
T1P10D01 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T1P10D02 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

BRON/PUT(C um.cm/dag) in Elem. 10

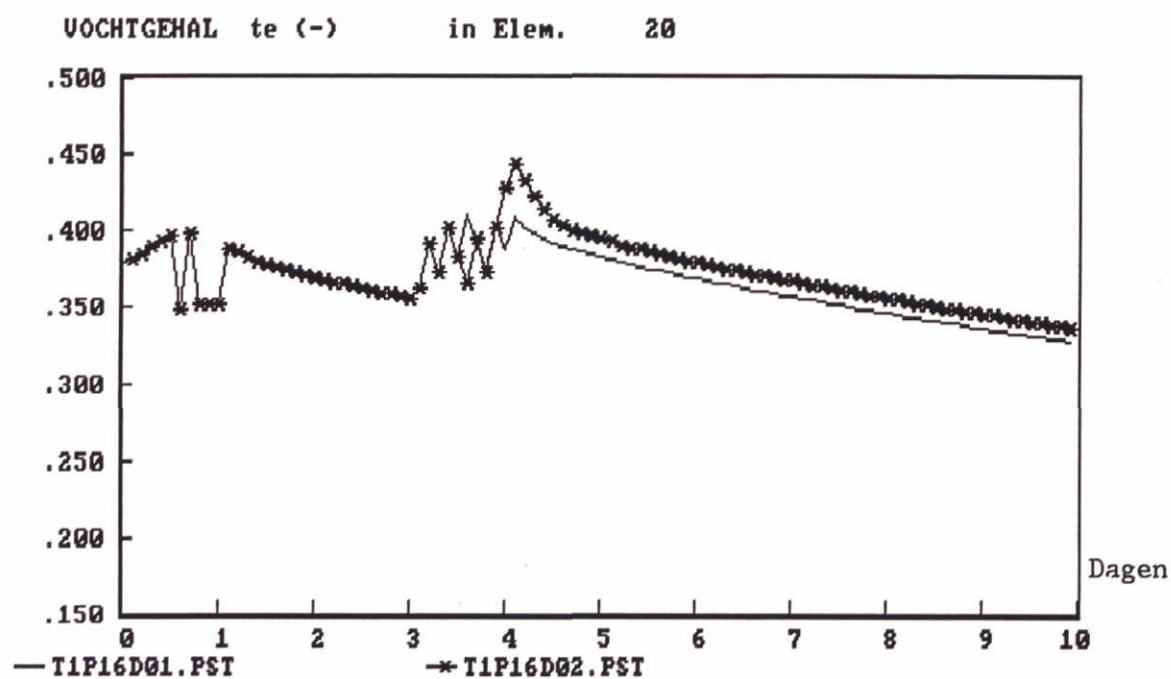


T1P10D01 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T2P10D02 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

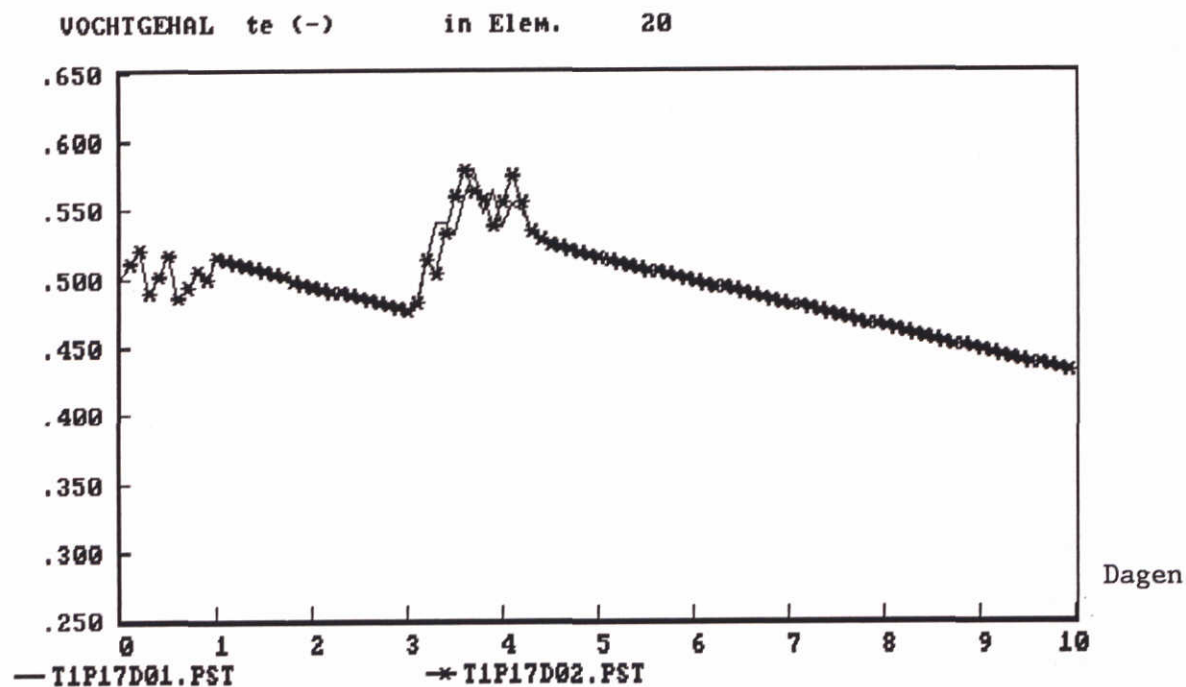


T1P16D01 = Profiel 16 (B10,O10; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T2P16D02 = Profiel 16 (B10,O10; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

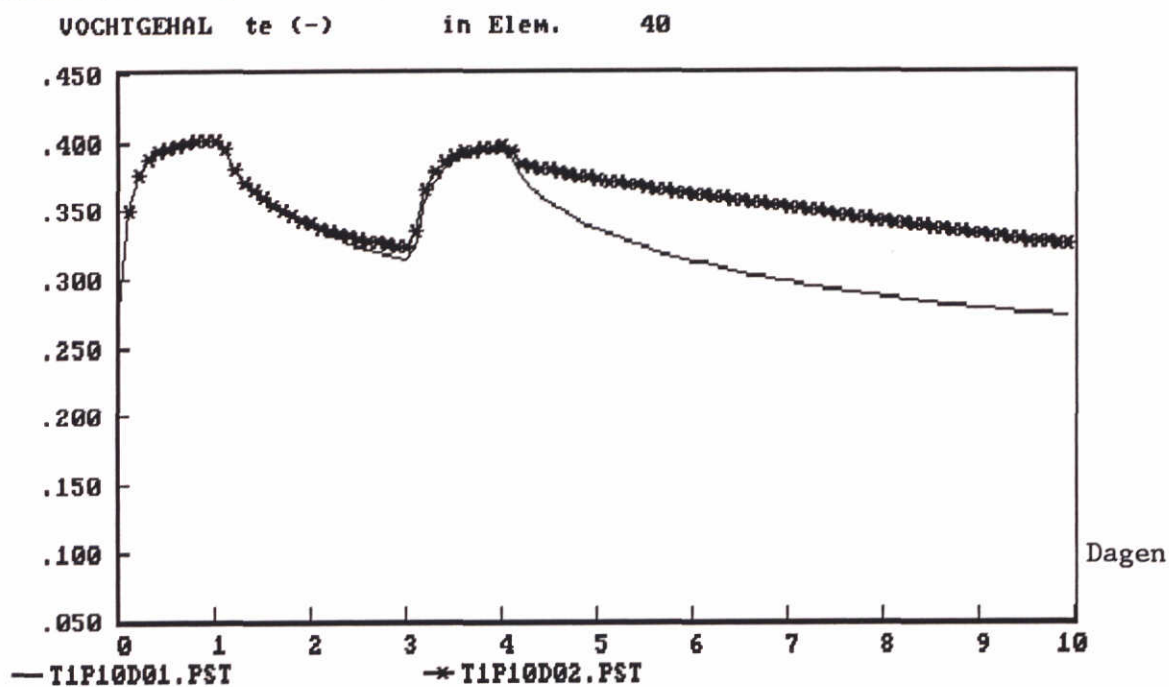


T1P17D01 = Profiel 17 (B12,O13; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T2P17D02 = Profiel 17 (B12,O13; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



T1P10D01 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

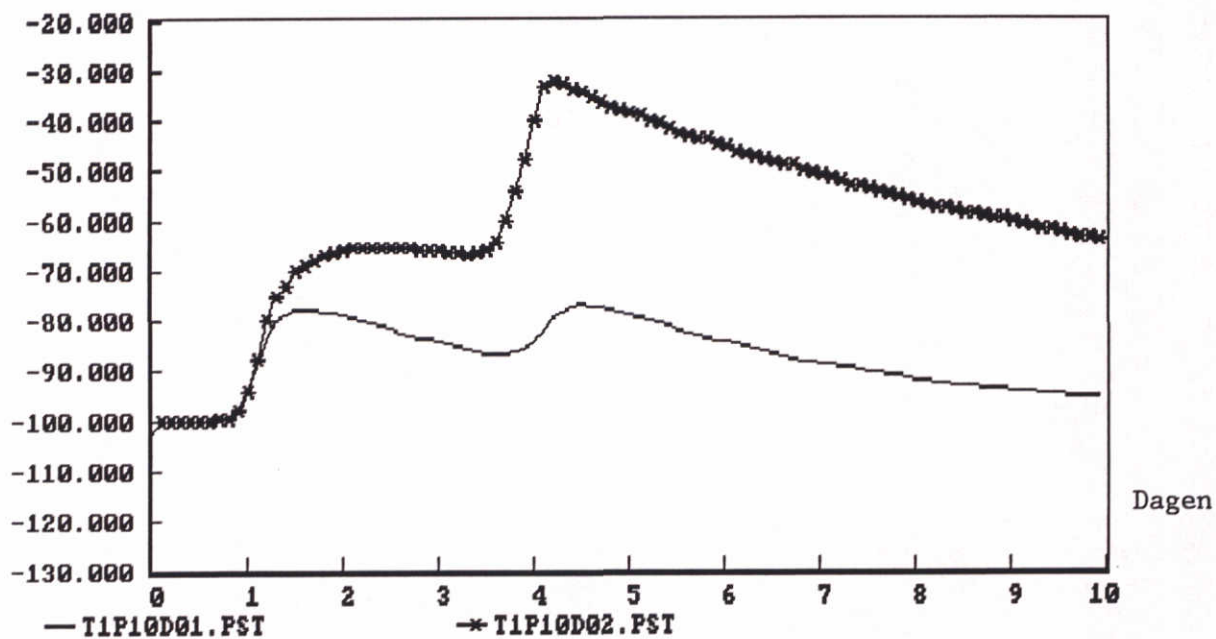
T2P10D02 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

DIEPTE (CM +mv)

in Elem. 20



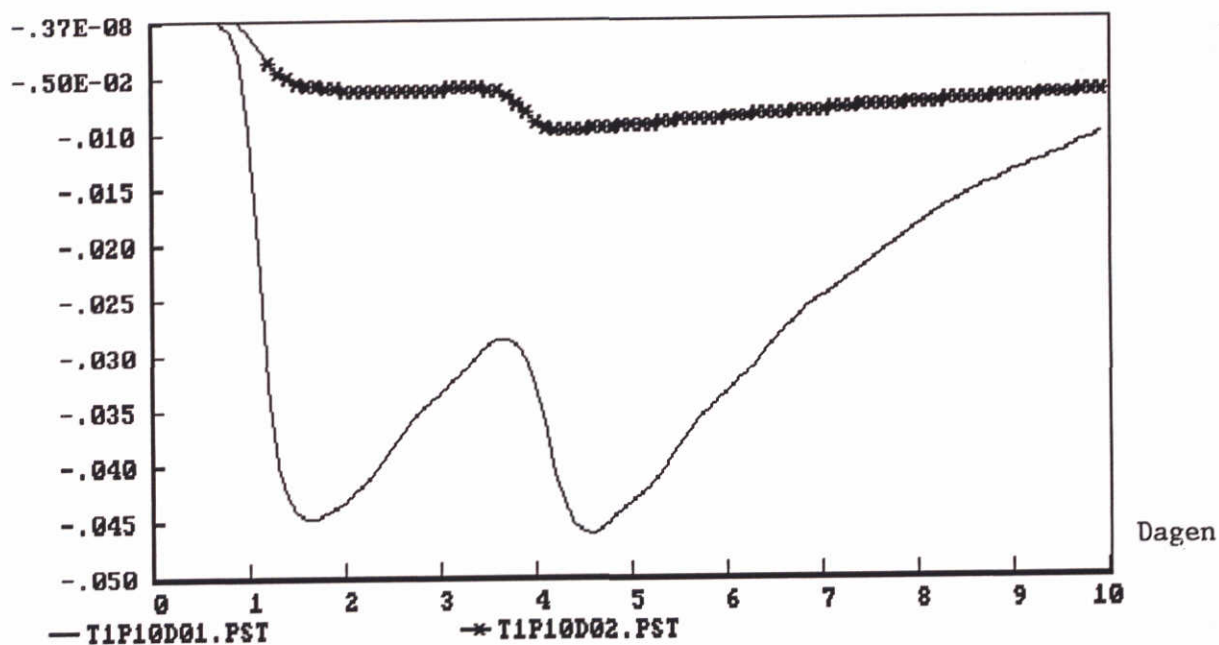
T1P10D01 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T1P10D02 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

BRON/PUT(C um.cm/dag) in Elem. 20

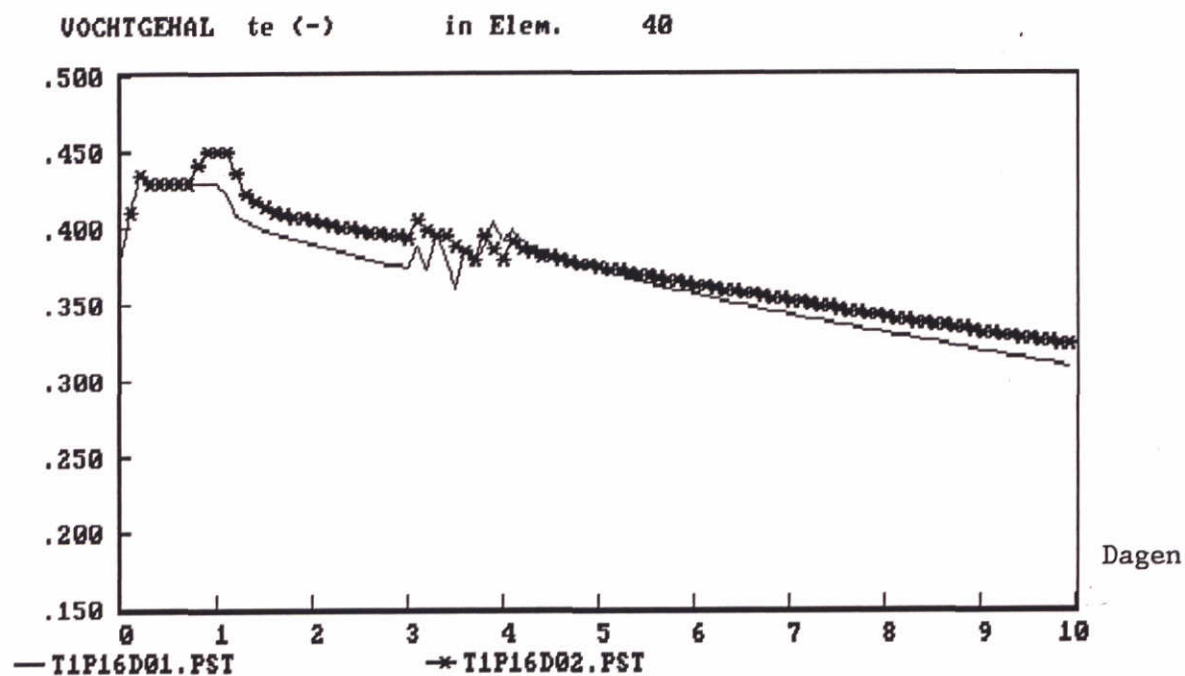


T1P10D01 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T2P10D02 = Profiel 10 (B2,O2,O5; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen

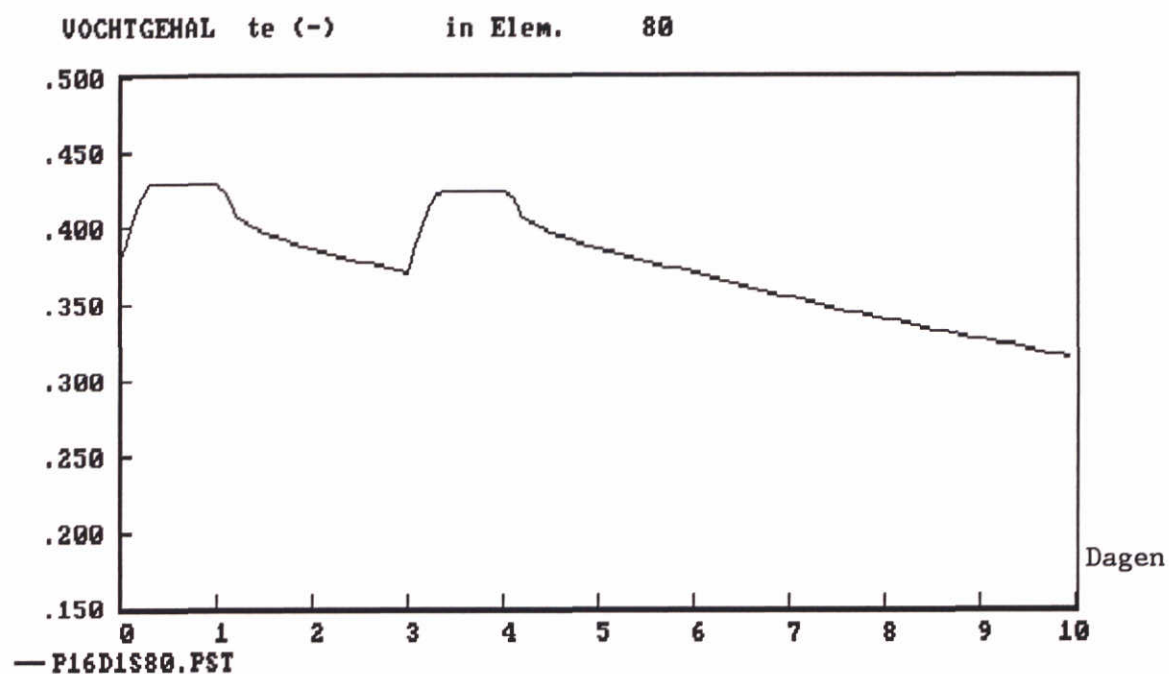


T1P16D01 = Profiel 16 (B10,O10; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

T2P16D02 = Profiel 16 (B10,O10; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, zwakke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

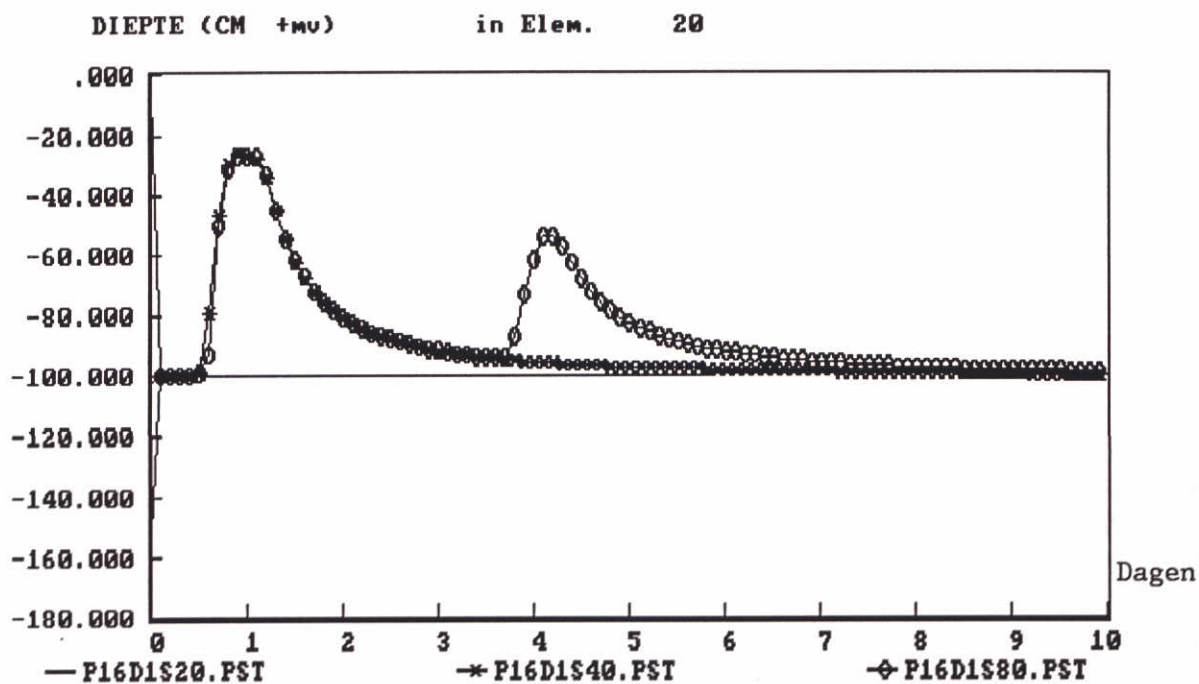
Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



P16D1S80 = Profiel 16 (B10,O10; 80 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

MOZART - prototype:
landelijke analyses en regionale

Model voor de onverzadigde zone voor
toepassingen



P16D1S20 = Profiel 16 (B10,O10; 20 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

P16D1S40 = Profiel 16 (B10,O10; 40 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

P16D1S80 = Profiel 16 (B10,O10; 80 segmenten), tijdstap 0.05 dag, sterke drainage

Appendix G De predictor-corrector methode

G.1 Inleiding

Deze appendix beschrijft de onderzochte predictor-corrector methode. Deze methode is als eerste onderzocht. Nadat bleek dat de eerste resultaten onvoldoende bevredigend waren is het onderzoek overgestapt naar de iteratieve methode. Voor de volledigheid wordt de predictor-corrector methode in deze appendix beschreven.

G.2 Details van het rekenschema

De numerieke methode die uit de literatuur naar voren is gekomen is afgeleid uit verschillende methoden. Voor details wordt verwezen naar het rapport Afwegingen numerieke methoden in MOZART (WL, 1994). De achtergronden hiervoor zijn, dat geen enkele auteur een bevredigende oplossing biedt voor het probleem van volumebehoud, terwijl dit voor waterkwaliteitsberekeningen van groot belang is. Een oplossing echter is de gediscretiseerde vergelijking af te leiden via "eindige volumes" (zie bijvoorbeeld WL, 1988).

De gediscretiseerde vergelijking wordt als volgt afgeleid:

- Definieer het numerieke rooster als volgt:
 - de bodem wordt verdeeld in n opeenvolgende "binnensegmenten"
 - elk segment i wordt gekenmerkt door een roosterpunt z_i en twee grensvlakken ter plaatse $z_{i-1/2}$ en $z_{i+1/2}$, zodanig dat het grensvlak precies tussen twee roosterpunten ligt:

$$z_{i-1/2} = (z_{i-1} + z_i)/2, \quad i = 1, \dots, n+1 \quad (\text{G-1})$$

De roosterpunten 0 en $n+1$ vallen zijn zogenaamde virtuele punten en vallen buiten het rekengebied. Deze punten worden gebruikt voor de implementatie van de randvoorwaarden. Hieraan zijn twee "randsegmenten" geassocieerd die eveneens buiten het rekengebied vallen en waarop de externe condities betrekking hebben. De afstand tussen de roosterpunten i en $i+1$ wordt aangeduid met $\Delta z_{i+1/2}$. De afstand tussen de grensvlakken, het "volume" van het segment is:

$$V_i = z_{i+1/2} - z_{i-1/2} = \frac{1}{2}(z_{i+1} - z_{i-1}) \quad (\text{G-2})$$

- Integreer de oorspronkelijke differentiaalvergelijking (vergelijking (1) uit hoofdstuk 2.1) over segment i .
- De resulterende vergelijking is:

$$\frac{d}{dt} \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} \theta dz = K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{z_{i+\frac{1}{2}}} - K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \Big|_{z_{i-\frac{1}{2}}} + \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} S(h,z) dz \quad (\text{G-3})$$

waarin de fluxen over de twee grensvlakken duidelijk te herkennen zijn.

- Voer nu de volgende grootheden in:

θ_i^j - het (gemiddelde) vochtgehalte in segment i op tijdstip j

h_i^j - de drukhoogte in het roosterpunt behorend bij segment i (ter plaatse van z) op tijdstip j

- Schat de ruimtelijke gradiënten en de gradiënten in de tijd:

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_i^{j+1}}{dt} &\approx \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} \\ \frac{\partial h^{j+1}}{\partial z} \Big|_{z_{i+\frac{1}{2}}} &\approx \frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z_i} \end{aligned} \quad (\text{G-4})$$

- Schat de doorlatendheid op het grensvlak door een schatting van de doorlatendheid in de omliggende roosterzellen:

$$K_{i+\frac{1}{2}}^j \approx \frac{2K(h_i^j) K(h_{i+1}^j)}{K(h_i^j) + K(h_{i+1}^j)} \quad (\text{G-5})$$

Deze zogeheten harmonische middeling wordt nader toegelicht in Appendix A.

- Schat de bronterm bijvoorbeeld als volgt:

$$\int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} S(h,z) dz \approx S(h_i^j, z_i) V_i \quad (\text{G-6})$$

- Randvoorwaarden met een voorgeschreven flux zijn eenvoudig te implementeren: in plaats van coëfficiënten te berekenen kun je eenvoudig de flux invullen in de vergelijking voor het segment dat net boven of net onder de betreffende rand ligt. Voor randvoorwaarden met voorgeschreven drukhoogte kan in de gediscretiseerde vergelijkingen eenvoudig de drukhoogte worden ingevuld.
- Overgangen in de bodemeigenschappen (bijvoorbeeld een laag klei in een overigens zandige bodem) gaan gepaard met interne randvoorwaarden: ondanks de sprong in bodemeigenschappen mag de flux noch de drukhoogte een sprong vertonen. Het rekenschema moet daarmee rekening houden. Dit kan elegant worden afgehandeld via de middelingsprocedure die is beschreven in Appendix A. Het voordeel van deze methode is dat een overgang in bodemeigenschappen geen enkel gevolg heeft voor het rooster en dat alle grootheden eenduidig gedefinieerd zijn per cel. (Een bijko-

mend voordeel is dat hierdoor de modelresultaten eenvoudig te gebruiken zijn in een waterkwaliteitsberekening.)

Op deze wijze zijn er echter meer onbekenden dan vergelijkingen: er ontbreekt een relatie tussen het vochtgehalte en de drukhoogte. We maken gebruik van de differentiële vochtcapaciteit en komen zodoende uit op het standaardschema (Hornung en Messing 1980). Omdat voor waterkwaliteitsberekeningen het vochtgehalte van belang is, moet uiteindelijk ook dit bepaald worden. Voor de volumebalans moeten we echter het vochtgehalte kennen. Daartoe hoeven we niet vergelijking (2) uit hoofdstuk 2.1. te gebruiken.

We kunnen ook gebruik maken van de resultaten voor de nieuwe tijdstap, want de fluxen zijn bekend. Het voordeel daarvan is dat het resulterende schema volumebehoudend is.

Per tijdstap worden er twee stappen gezet: een predictorstap en een correctorstap. Uit de resultaten van de eerste stap worden de doorlatendheid en de vochtcapaciteit voor de tweede stap bepaald. Als de twee stappen dezelfde weegfactor krijgen (zie ook hoofdstuk G3), dan zijn de rekenstappen:

- predictor:

$$V_i \left(\frac{C_i^j}{\frac{1}{2}\Delta t} - \frac{1}{2}\sigma_i^j \right) (h_i^{j+\frac{1}{2}} - h_i^j) = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^j}{\Delta z_i} (h_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - h_i^{j+\frac{1}{2}} + \Delta z_i) - \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^j}{\Delta z_{i-1}} (h_i^{j+\frac{1}{2}} - h_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} + \Delta z_{i-1}) \quad (\text{G-7a})$$

$$+ V_i S_i^j$$

- corrector:

$$V_i \left(\frac{C_i^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \sigma_i^{j+\frac{1}{2}} \right) (h_i^{j+1} - h_i^j) = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}}{2\Delta z_i} (h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1} + h_{i+1}^j - h_i^j + 2\Delta z_i) \quad (\text{G-7b})$$

$$- \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}}{2\Delta z_{i-1}} (h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1} + h_i^j - h_{i-1}^j + 2\Delta z_{i-1}) + V_i S_i^{j+\frac{1}{2}}$$

Het vochtgehalte kan dan bepaald worden uit:

$$V_i \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}}{2\Delta z_i} (h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1} + h_{i+1}^j - h_i^j + 2\Delta z_i) \quad (\text{G-8})$$

$$- \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}}{2\Delta z_{i-1}} (h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1} + h_i^j - h_{i-1}^j + 2\Delta z_{i-1})$$

$$+ V_i S_i^{j+\frac{1}{2}} + V_i \sigma_i^{j+\frac{1}{2}} (h_i^{j+1} - h_i^j)$$

waarbij de bronterm $S(h,z)$ voor tijdsniveau $j+1$ is benaderd met een expliciete en een impliciete term:

$$\int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} S(h,z) dz \approx V_i S_i^j + V_i \sigma_i^j (h_i^{j+1} - h_i^j) \quad (G-9)$$

In deze formule is σ_i^j een benadering van $\partial S_i / \partial h_i$ op tijdstip j . De uitdrukking voor de bronterm zal vaak zodanig zal zijn dat een dergelijke benadering niet goed mogelijk is, of dat (G-9) slechts een gedeeltelijke linearisatie in de tijd is. In deze gevallen kan het beter zijn om de bronterm maar gewoon volledig expliciet in de tijd te integreren, i.e. om σ_i^j gelijk aan nul te stellen.

De afhandeling van de twee soorten randvoorwaarden is eenvoudig:

- **Opgelegde drukhoogte:**
In dit geval is de drukhoogte in het randsegment gegeven en deze waarde kan rechtstreeks worden ingevuld in de vergelijking voor het aangrenzende binnensegment.
- **Opgelegde flux:**
In dit geval is de flux over een van de grensvlakken gegeven en in plaats dat de betreffende coëfficiënten worden berekend voor dit grensvlak, wordt de flux rechtstreeks ingevuld in de vergelijking voor het aangrenzende binnensegment.

Uiteindelijk moeten er steeds stelsels lineaire vergelijkingen worden opgelost met als bijzondere kenmerk dat de matrix tridiagonaal is: per vergelijking zijn de onbekenden h_i , h_{i-1} en h_{i+1} voor een bepaald tijdstip. Voor dergelijke stelsels bestaat een zeer efficiënt algoritme, zodat het oplossen ervan weinig rekentijd vergt.

De vergelijkingen kunnen schematisch worden voorgesteld als:

$$\begin{aligned} i = 1, \dots, n: \quad & a_i h_{i-1} + b_i h_i + c_i h_{i+1} = f_i \\ & a_1 \equiv 0, \quad c_n \equiv 0 \end{aligned} \quad (G-10)$$

De oplossing van een dergelijk tridiagonaal stelsel is reeds beschreven in hoofdstuk 2.2.

Wanneer een oplossing is verkregen voor het nieuwe tijdstip via de predictor- en de correctorstappen, dan zijn alle fluxen over de grensvlakken bekend en kan dus de laatste stap gezet worden: de bepaling van de vochtgehalten voor dit nieuwe tijdstip. Dit houdt in dat de fluxen worden berekend per grensvlak en dat de massabalans wordt opgelost. Aangezien dit per segment gebeurt (zie vergelijking G-8), zijn daarvoor slechts enkele eenvoudige bewerkingen nodig. Deze steunen bovendien niet op de differentiële vochtcapaciteit, zodat de verzadigde zone ook hier geen belemmering vormt.

G.3 Verfiningen van de predictor-corrector methode

G.3.1 Verbeteringen aan het numerieke schema

De vergelijkingen die in hoofdstuk G.2. zijn gepresenteerd gaan er vanuit dat de twee stappen in de predictor-correctormethode een gelijk gewicht hebben. Dit aspect zal nader geanalyseerd worden. We beginnen met vergelijking (3) uit hoofdstuk 2.1. Deze differentiaalvergelijking wordt als volgt in de ruimte gediscetiseerd:

$$V_i C_i \frac{dh_i}{dt} = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} (h_{i+1} - h_i + \Delta z_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{K_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} (h_i - h_{i-1} + \Delta z_{i-\frac{1}{2}}) \quad (G-14)$$

We beschouwen nu een kleine verstoring δh_i van h_i en onderzoeken het gedrag van die verstoring in de tijd als functie van het gebruikte tijdsintegratieschema. Zowel h_i als $h_i + \delta h_i$ voldoen aan vergelijking (G-14). Zodoende krijgen we de volgende vergelijking voor δh_i :

$$\begin{aligned} V_i C_i \frac{d\delta h_i}{dt} &= K_{i+\frac{1}{2}} \frac{\delta h_{i+1} - \delta h_i}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} - K_{i-\frac{1}{2}} \frac{\delta h_i - \delta h_{i-1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} - V_i \frac{dC}{dh} \Big|_i \frac{dh_i}{dt} \delta h_i + \\ &+ \frac{dK}{dh} \Big|_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} + 1 \right) \frac{\delta h_{i+1} + \delta h_i}{2} - \frac{dK}{dh} \Big|_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{h_i - h_{i-1}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} + 1 \right) \frac{\delta h_i + \delta h_{i-1}}{2} \\ &+ O(\delta h_i^2) \end{aligned} \quad (G-15)$$

met:

$$\frac{dC}{dh} \Big|_i = \frac{dC}{dh} \Big|_{h=h_i}, \text{ enz}$$

Na linearisatie en met de veronderstelling van lokaal constante coëfficiënten wordt vergelijking (G-15)

$$C \frac{d\delta h_i}{dt} = K \frac{\delta h_{i+1} - 2\delta h_i + \delta h_{i-1}}{\Delta z^2} - C' \delta h_i + K' \frac{\delta h_{i+1} - \delta h_{i-1}}{2\Delta z} \quad (G-16)$$

met C' een typische waarde voor $\frac{dC}{dh} \Big|_i \frac{dh_i}{dt}$ en K' een typische waarde van

$$\frac{dK}{dh} \Big|_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} + 1 \right)$$

De laatste twee termen van deze vergelijking zijn het resultaat van de linearisatie van de niet-lineaire coëfficiënten C en K , die in de tijdsdiscretisatie expliciet worden genomen. Daarom geeft toepassing van het predictor-correctorschema van paragraaf G.2 op vergelijking (G-16):

$$C \frac{\delta h_i^{j+\frac{1}{2}} - \delta h_i^j}{\frac{1}{2} \Delta t} = K \frac{\delta h_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - 2\delta h_i^{j+\frac{1}{2}} + \delta h_{i-1}^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} - C' \delta h_i^j + K' \frac{\delta h_{i+1}^j - \delta h_{i-1}^j}{2\Delta z} \quad (\text{G-17})$$

$$C \frac{\delta h_i^{j+1} - \delta h_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{2} K \left(\frac{\delta h_{i+1}^{j+1} - 2\delta h_i^{j+1} + \delta h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z^2} + \frac{\delta h_{i+1}^j - 2\delta h_i^j + \delta h_{i-1}^j}{\Delta z^2} \right) +$$

$$-C \delta h_i^{j+\frac{1}{2}} + K' \frac{\delta h_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - \delta h_{i-1}^{j+\frac{1}{2}}}{2\Delta z}$$

Dit schema is een combinatie van het tweede-orde nauwkeurige, impliciete Crank-Nicholson schema, en het tweede-orde nauwkeurige, expliciete tweestapsschema van Heun. Beide schema's kunnen worden uitgebreid met een zogeheten Θ -weging in de tijd ter bevordering van de dissipatieve eigenschappen. Hoewel dit ten koste gaat van de *orde* van nauwkeurigheid, verbetert zowel de nauwkeurigheid op zich als de robuustheid van het schema, omdat daardoor eventuele oscillaties in de tijd worden onderdrukt. De Θ -methode is beschreven in Appendix H. Hierin is a een in het algemeen complexe eigenwaarde van het stelsel (G-16), en δh de amplitude van de bijbehorende eigenmode.

De conclusie is dat voor puur imaginaire a de expliciete methode onvoorwaardelijk instabiel is voor $\Theta \leq \frac{1}{2}$, maar dat het stabiliteitsgebied langs de imaginaire as steeds groter wordt naarmate Θ groter dan $\frac{1}{2}$, doch ≤ 1 , genomen wordt. Het stabiliteitsgebied langs de reële as wordt tegelijkertijd echter kleiner. Het is niet te verwachten dat dit laatste problemen geeft. Het reële deel van a wordt met name veroorzaakt door de eerste twee termen in het rechterlid van (G-16), waarvan de eerste impliciet in de tijd gediscrètiseerd zal worden, hetgeen de expliciete tijdsintegratie van de tweede term stabiliseert. Het imaginaire deel van a wordt echter nagenoeg uitsluitend veroorzaakt door de derde expliciet in de tijd geïntegreerde term in het rechterlid van (G-16), en dus kan de stabiliserende werking van $\Theta \geq \frac{1}{2}$ wel degelijk belangrijk zijn in de praktijk. Dit hangt af van de stabiliserende werking van het niet-lineaire terugkoppelmechanisme, die in het uiteindelijke schema wel aanwezig is, maar in de analyse niet meegenomen kan worden. Het effect daarvan zal dus eventueel experimenteel moeten worden vastgesteld.

Samenvattend komen we tot de volgende uitbreiding van het schema in paragraaf G.2 uit:

- predictor:

$$V_i C_i^j \frac{h_i^{j+\Theta} - h_i^j}{\Theta \Delta t} = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^j}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} \left(h_{i+1}^{j+\Theta} - h_i^{j+\Theta} + \Delta z_{i+\frac{1}{2}} \right) - \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^j}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} \left(h_i^{j+\Theta} - h_{i-1}^{j+\Theta} + \Delta z_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{G-18a})$$

- corrector:

$$V_i C_i^{j+\Theta} \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+\Theta}}{\Delta z_{i+\frac{1}{2}}} \left(\Theta (h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}) + (1-\Theta) (h_{i+1}^j - h_i^j) + \Delta z_{i+\frac{1}{2}} \right) +$$

$$-\frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j+\Theta}}{\Delta z_{i-\frac{1}{2}}} \left(\Theta (h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}) + (1-\Theta) (h_i^j - h_{i-1}^j) + \Delta z_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{G-18b})$$

Men zou kunnen overwegen om in (G-17a) en (G-17b) verschillende waarden voor Θ te gebruiken. Er is echter geen reden om aan te nemen dat dit voordelen biedt. Een plaats- en tijdsafhankelijke Θ kan daarentegen wel nuttig zijn, bijvoorbeeld: kies $\Theta > \frac{1}{2}$ alleen dan en daar waar oscillaties in de tijd (extra) onderdrukt moeten worden. Deze optie dient alleen overwogen te worden als blijkt dat vaak met een Θ veel groter dan $\frac{1}{2}$ moet worden gerekend, want dit gaat ten koste van de nauwkeurigheid.

Voor wat betreft het toepassen van de Θ -methode voor de tijdsintegratie van brontermen is er sprake van een stabiliteitsprobleem: hoe de wegingsfactor Θ te kiezen, als de numerieke tijdstap niet meer klein is t.o.v. de tijdschaal van de bronterm? Door het feit dat de bronterm een functie is van de grondwaterstand en niet van de lokale drukhoogte is daar heel moeilijk iets zinnigs over te zeggen. Daar komt bij dat het stabiliteitsgebied voor deze factor afhangt van het teken van $\partial S/\partial h$:

- als $\partial S/\partial h$ positief is (meekoppeling), dan moet Θ tussen 0 en $\frac{1}{2}$ liggen
- als $\partial S/\partial h$ negatief is (tegenkoppeling), dan moet Θ tussen $\frac{1}{2}$ en 1 liggen

Daarom lijkt het het beste om voor de brontermen maar gewoon de "neutrale" wegingsfactor $\Theta = \frac{1}{2}$ te gebruiken, onafhankelijk van de waarde van Θ voor de andere termen in het numerieke schema. In de predictorstap voegen we daarom weer de term $V_i S_i^j = V_i S(h_i^j)$ toe aan het rechterlid, maar in de correctorstap wordt aan het rechterlid de term $V_i S_i^{j+\frac{1}{2}} = V_i S(h_i^{j+\frac{1}{2}})$ toegevoegd.

G.3.2 Praktische overwegingen

De eerste ervaringen met het prototype dat op basis van de predictor-corrector methode is gemaakt laten zien, dat het aanbeveling verdient om de Θ -methode te hanteren en meer nog om ervoor te zorgen dat begincondities nauw aansluiten bij de randvoorwaarden.

Berekeningen met een uniforme drukhoogte van circa -100 cm als beginvoorwaarde en een randvoorwaarde aan de onderzijde van 0 cm (dat wil zeggen: het grondwater staat net onder de beschouwde bodemlaag) laten soms slingeren in de tijd zien. Dit gebeurt met name als de tijdstap "groot" is. De berekeningen horen een stationair profiel op te leveren, waarbij de drukhoogte aan de onderzijde nul of bijna nul is en naar boven toe (tot aan het maaiveld) monotoon daalt (een steeds grotere absolute waarde krijgt).

Nader onderzoek van deze resultaten laat zien dat de slinging ontstaat in de eerste halve tijdstap: de drukhoogte moet zich aanpassen aan de nabije grondwaterspiegel. Doordat de

tijdstap eigenlijk te groot is, schiet de correctie door en er ontstaat een dunne verzadigde laag. Deze verzadigde laag ligt boven de feitelijke grondwaterstand en in de volgende halve tijdstap wordt dit gedeeltelijk teruggedraaid.

Als er geen dempend mechanisme is, dan kan de slingering zich lange tijd handhaven. Zo'n mechanisme wordt geleverd door de Θ -methode. De prijs die men ervoor betaalt is de nauwkeurigheid.

Er zijn twee alternatieven:

- Een kleine tijdstap hanteren, eventueel alleen gedurende de inspeelperiode.
- Voorkomen dat er sprongen bestaan in de drukhoogte, bijvoorbeeld door een beginconditie te kiezen waarbij de drukhoogte in de gemodelleerde laag geleidelijk overgaat in de drukhoogte op de rand.

Voor beide valt wat te zeggen, maar het moet gesteld worden dat zelfs dan de Θ -methode niet geheel overbodig is. De brontermen om de drainage te beschrijven kunnen namelijk een schakeleffect hebben, bijvoorbeeld: doordat de grondwater boven een bepaald niveau uitkomt wordt de drainage aangezet. Dit kan een zekere sprong geven in de drukhoogte en daarmee een slingering in gang zetten. De praktijk zal uit moeten wijzen of dit daadwerkelijk gebeurt.

G.3.3 Testen van de predictor-corrector methode

De predictor-corrector methode is getest op een aantal sets testgevallen. De diverse sets onderscheiden zich door variaties in de tijdstaplengte, het aantal segmenten, begin- en randvoorwaarden en drainagefuncties. Bij het testen is vooral gelet op:

- het verloop van vochtspanning, flux en vochtgehalte, in plaats en tijd;
- verschillen veroorzaakt door verschil in tijdstaplengte en aantal segmenten; en
- het optreden van ongewenste afwijkingen zoals:
 - numerieke instabiliteiten;
 - inconsistente vochtgehalten (onder- of overschrijding van grenswaarden)
 - inconsistenties in vochtprofiel

Hiervoor zijn testsets samengesteld met respectievelijk:

- constante verdamping
- variabele neerslag
- variabele neerslag met inhomogene bodem
- inhomogene bodem met diverse drainagefuncties

De resultaten van de tests worden hier niet in detail beschreven. In het algemeen blijken er veel numerieke problemen te zijn, met uitzondering van de set met een constante verdamping. Derhalve is geconcludeerd dat de predictor-corrector methode niet voldoende robuust is, en niet geschikt is om alle praktijkproblemen met een acceptabele tijdstaplengte op te lossen.

Voor bijvoorbeeld een druk van enkele cm als bovenrandvoorwaarde bij een initieel onverzaagd profiel moest met tijdstappen van kleiner dan 0.001 dag gerekend worden om redelijke resultaten te krijgen. Daarom is gezocht naar een alternatieve methode. Deze is beschreven in de hoofdtekst van het rapport.

Voor een enkel geval is nadien nog een vergelijking van de predictor-corrector methode en de iteratieve methode uitgevoerd. Dit is gedaan voor profiel 16 uit de Staring reeks (zie hoofdstuk 4.6 en appendix F).

Voor een geval van 20 segmenten is de predictor-corrector methode met een tijdstap van 0.01 dag gedraaid, zodat het totaal aantal iteraties vergelijkbaar was met de iteratieve methode. Het bleek dat er bij de predictor-corrector methode duidelijk meer instabiliteiten optraden. Echter, ook voor de iteratieve methode zijn de resultaten nog niet geheel naar wens. Omdat het aantal van 20 segmenten op 200 cm betekent dat er niet wordt voldaan aan het voldoende criterium uit hoofdstuk 3.3 is dit inderdaad mogelijk. Er wordt nog eens op gewezen dat het niet voldoen aan dat criterium nog niet per definitie betekent dat het fout gaat, het criterium geeft een voldoende maar geen noodzakelijke voorwaarde.

Daarom is de vergelijking ook nog eens gedaan voor het geval met 80 segmenten. Voor dit geval zijn de resultaten van de iteratieve methode bevredigend, terwijl er bij de predictor-corrector methode nog flutter en profile errors voorkomen.

Daarom lijkt voorlopig de conclusie gerechtvaardigd dat de iteratieve methode een betere performance heeft dan de predictor-corrector methode.

Appendix H De theta-methode

Beschouw de gewone differentiaalvergelijking:

$$\frac{d\delta h}{dt} = a \delta h, \quad \text{Re}(a) \leq 0 \quad (\text{H1})$$

De impliciete Θ -methode voor (H1) is:

$$\frac{\delta h^{j+1} - \delta h^j}{\Delta t} = a (\Theta \delta h^{j+1} + (1 - \Theta) \delta h^j), \quad (\text{H2})$$

met een versterkingsfactor per tijdstap:

$$\frac{\delta h^{j+1}}{\delta h^j} = \frac{1 + (1 - \Theta)a \Delta t}{1 - \Theta a \Delta t} \quad (\text{H3})$$

Met andere woorden, (H2) is onvoorwaardelijk stabiel voor $\frac{1}{2} \leq \Theta \leq 1$, en wordt steeds dissipatiever naarmate Θ van $\frac{1}{2}$ naar 1 opschuift. Dit is van belang voor het onderdrukken van oscillaties in de tijd bij gebruik van een (te) grote tijdstap, zoals onmiddellijk duidelijk wordt bij een nadere beschouwing van (H3). Deze uitdrukking gaat, bij $\Theta = \frac{1}{2}$, naar -1 als $\Delta t \rightarrow \infty$ en een negatieve versterkingsfactor betekent: oscillaties.

De expliciete Θ -methode voor (H1) is:

$$\frac{\delta h^{j+\Theta} - \delta h^j}{\Theta \Delta t} = a \delta h^j, \quad (\text{H4})$$

$$\frac{\delta h^{j+1} - \delta h^j}{\Delta t} = a \delta h^{j+\Theta},$$

met als versterkingsfactor per tijdstap:

$$\frac{\delta h^{j+1}}{\delta h^j} = 1 + a \Delta t (1 + \Theta a \Delta t) \quad (\text{H5})$$

Nadere beschouwing van (H5) laat zien dat voor puur imaginaire a methode (H4) onvoorwaardelijk instabiel is voor $\Theta \leq \frac{1}{2}$, maar dat het stabiliteitsgebied langs de imaginaire as steeds groter wordt naarmate Θ groter dan $\frac{1}{2}$, doch ≤ 1 , genomen wordt. Het stabiliteitsgebied langs de reële as wordt tegelijkertijd echter kleiner. Het is niet te verwachten dat dit laatste problemen geeft.



hoofdkantoor
Rotterdamseweg 185
postbus 177
2600 MH Delft
telefoon (015) 56 93 53
telefax (015) 61 96 74
telex 38176 hydel-nl

locatie 'De Voorst'
Voorsterweg 28, Marknesse
postbus 152
8300 AD Emmeloord
telefoon (05274) 29 22
telefax (05274) 35 73

