

T1589

AFGEHANDELD

opdrachtgever:

Rijkswaterstaat, RIKZ

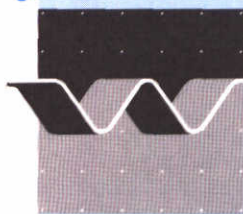
## Voorstudie aansluiting DELWAQ op SIMONA

September 1995



95-04

**EDS**

T1589



**waterloopkundig laboratorium | WL**

	bibliotheek postbus 177 - 2600 MH Delft waterloopkundig laboratorium/WL
<b>BB</b>	88307
<b>WL</b>	T 1589
<b>EXPL</b>	 F0002974

## Voorstudie aansluiting DELWAQ op SIMONA

J.J. Noort (EDS)

L. Postma (WL)

# Inhoud

	<b>Samenvatting en conclusies</b> . . . . .	iii
<b>1</b>	<b>Inleiding</b> . . . . .	1 – 1
<b>2</b>	<b>Probleemstelling</b> . . . . .	2 – 1
<b>3</b>	<b>Export van waterbewegingsresultaten voor gebruik door DELWAQ</b> . . .	3 – 1
3.1	De grootheden afkomstig van de waterbewegingsberekening . . . .	3 – 1
3.1.2	Basisgrootheden . . . . .	3 – 2
3.1.3	Enkele bijzondere voorwaarden . . . . .	3 – 3
3.1.4	Redundantie . . . . .	3 – 3
3.1.5	Mogelijke problemen in de praktijk . . . . .	3 – 4
3.2	De fysieke aanmaak van de DELWAQ invoerfiles . . . . .	3 – 5
3.2.1	De invoerfile . . . . .	3 – 6
3.2.2	De VOLUMES file . . . . .	3 – 8
3.2.3	De Van, Naar pointer tabel . . . . .	3 – 8
3.2.4	Een optionele dispersie file . . . . .	3 – 8
3.2.5	Een dwarsdoorsnede- of debieten file . . . . .	3 – 8
3.2.6	Een van-naar lengtes file . . . . .	3 – 8
3.3	Gebruik van de SIMONA input file voor DELWAQ . . . . .	3 – 9
3.3.1	Gebruik van SIPREP . . . . .	3 – 9
3.3.2	De beschrijving van de input file . . . . .	3 – 12
3.3.3	Volgorde . . . . .	3 – 12
3.3.4	Modelidentificatie . . . . .	3 – 14
3.3.5	Actieve en inactieve stoffen . . . . .	3 – 14
3.3.6	Integratie (en andere) timers . . . . .	3 – 14
3.3.7	Uitvoer grootheden . . . . .	3 – 15
3.3.8	Tijdreeksen . . . . .	3 – 15
3.3.9	Schaalfactoren . . . . .	3 – 17
3.3.10	USERDATA_TRANSPORTS . . . . .	3 – 17

<b>4</b>	<b>Ruimtelijke samenneming van rekenvakken</b> . . . . .	<b>4 - 1</b>
4.1	Wijze van samennemen . . . . .	4 - 1
4.2	Integratie van samenneming in het koppelingsprogramma . . . . .	4 - 3
4.3	Benodigde invoer voor het interactieve programma DIDO . . . . .	4 - 5
4.4	Uitvoer uit het programma DIDO . . . . .	4 - 6
4.5	Wat de koppelingsroutines gaan doen . . . . .	4 - 7
<b>5</b>	<b>Koppeling DELWAQ - SIMVIEW</b> . . . . .	<b>5 - 1</b>
<b>6</b>	<b>Beheer, onderhoud en normen</b> . . . . .	<b>6 - 1</b>
<b>7</b>	<b>Werkplan en begroting</b> . . . . .	<b>7 - 1</b>
7.1	Export van waterbewegings resultaten . . . . .	7 - 1
7.2	Generatie van een SIMONA keyword structuur invoerfile voor DELWAQ . . . . .	7 - 1
7.3	Schrijven van een DELWAQ invoer processor op basis van de keywordstructuur . . . . .	7 - 1
7.4	Aanpassen van DIDO . . . . .	7 - 2
7.5	Naverwerking . . . . .	7 - 2
7.6	Uittesten . . . . .	7 - 3
7.7	Beheer en onderhoud . . . . .	7 - 3
7.8	Samenvattende begroting met opties . . . . .	7 - 4

## Samenvatting en conclusies

### *Samenvatting:*

Bij Rijkswaterstaat wordt sinds een tiental jaren gewerkt aan de ontwikkeling van een generiek gestandaardiseerd decision support system (DSS) voor integraal water- en kustbeheer. Sommige onderdelen zijn in een gevorderd stadium en worden nu al of op korte termijn in de beheerspraktijk toegepast. Één van deze onderdelen betreft het fysische modellensysteem SIMONA. Er bestaat een groeiende behoefte om biologische procesmodellen te koppelen aan fysische modellen om bijvoorbeeld de ruimtelijke variabiliteit van ecologische en systeemkenmerken in een watersysteem te onderzoeken.

EDS heeft in opdracht van het Rijksinstituut voor Kust en Zee van Rijkswaterstaat (RIKZ) een studie gedaan naar de praktijk van het gebruik van de fysische modellen en ecologische modellen bij RIKZ. Tijdens deze studie zijn er grote verschillen geconstateerd tussen de fysische en ecologische modellering.

Wel is het van belang dat in verband met effectieve bedrijfsvoering en synergie, beide soorten modellering op elkaar aansluiten.

Bij het Waterloopkundig Laboratorium in Delft (WL) is het pakket DELWAQ ontwikkeld. DELWAQ is een computerpakket voor het modelleren van waterkwaliteit. DELWAQ heeft een uitgebreide set waterkwaliteitsmodellen. Rijkswaterstaat en WL zijn gezamenlijk eigenaar van DELWAQ.

In de periode 1988-1990 heeft in opdracht van Rijkswaterstaat-RIZA en de toenmalige DGW, een oplevering van DELWAQ voor gebruik binnen de Waterstaat plaatsgehad. Het betrof voornamelijk de toepassing gekoppeld aan het toenmalige WAQUA programma voor de hydrodynamica. Na de overgang van de belangrijke meerdimensionale hydrodynamische modellen in het SIMONA systeem, zijn in eerste instantie nog geen voorzieningen getroffen om DELWAQ simulaties daar op te laten aansluiten.

Naast DELWAQ is bij Rijkswaterstaat ook het pakket SENECA in gebruik. Het pakket SENECA is met name toegerust voor het opzetten van ecologische modellen, waarbij de nadruk ligt op flexibiliteit bij de opzet van de ecologische modelbeschrijving en ondersteuning bij de afregeling en validatie van deze modellen.

Voor de uitwisseling van de hydrodynamische gegevens uit de fysische modellen in SIMONA naar de verschillende waterkwaliteits- en ecologische modellen is gekozen voor een keyword gestructureerde SIMONA invoerfile.

Rijkswaterstaat heeft WL en EDS gevraagd om gezamenlijk een voorstudie uit te voeren naar de haalbaarheid van het gebruik van een keyword gestructureerde invoerfile voor de uitwisseling van hydrologische gegevens vanuit het WAQUA/TRIWAQ systeem naar DELWAQ en de generatie van deze file.

In het voorliggend rapport wordt een voorstel beschreven om een koppeling te realiseren tussen de SIMONA systemen WAQUA/TRIWAQ, SIMVIEW en DELWAQ. SIMVIEW is het post-processingsprogramma van SIMONA.

*Conclusies:*

- a) Het is goed mogelijk een koppelingsprogramma te schrijven dat gestroomlijnde DELWAQ waterkwaliteitsmodellering toestaat na de WAQUA/TRIWAQ-simulaties in SIMONA voor waterbeweging.  
Belangrijke programmagedeelten zijn hiervoor al klaar, alleen de generatie van een ASCII-DELWAQ invoerfile geeft aanleiding tot verdere overwegingen.
- b) In plaats van de bestaande DELWAQ invoerfile, zou door het koppelingsprogramma een invoerfile in SIMONA keyword structuur kunnen worden gemaakt. Door belangrijk voorwerk van ing. M.E. Sileon is aangetoond dat, met enkele detailwijzigingen in haar opzet, de huidige DELWAQ-functionaliteit kan worden gedekt.
- c) Tegenover het voordeel van een met overige SIMONA programma's vergelijkbare invoerstructuur staat het nadeel van het ombouwen van de DELWAQ invoer processor. Het nadeel kan verminderen in het licht der voordelen wanneer WL op dezelfde invoerstructuur overgaat.
- d) WL aarzelt hierin omdat de SIMONA invoerprogrammatuur enkele aspecten mist die WL kunnen beperken. Een inventarisatie van deze aspecten en een inschatting van de mogelijkheden om ze op te lossen heeft geen onderdeel uitgemaakt van het project. WL heeft wel toegezegd de SIMONA keyword gestructureerde invoerstructuur te supporten en te blijven supporten wanneer Rijkswaterstaat hiertoe besluit.
- e) Het is goed mogelijk de DIDO samennemingsprogrammatuur te gebruiken in combinatie met de koppelingsprogrammatuur, hier zijn drie niveaus van integratie mogelijk waarvan de meest geïntegreerde de voorkeur verdient.
- f) Een automatische aansluiting van de DELWAQ-simulatie resultaten op de SIMVIEW postprocessor voor SIMONA is goed te doen. Het is eveneens mogelijk DELWAQ-resultaten waaraan geen WAQUA-TRIWAQ simulatie ten grondslag heeft gelegen via SIMVIEW te visualiseren.

De onderdelen a, b, e en f zijn afzonderlijk uitvoerbaar, al wordt aanbevolen onderdeel e tezamen met a en b uit te voeren en onderdeel f niet zonder a en b uit te voeren. De onderdelen c en d horen bij elkaar. Eén en ander is in een modulaire begroting samen gebracht.

# 1 Inleiding

In de periode 1988-1990 heeft in opdracht van Rijkswaterstaat-RIZA en de toenmalige DGW, een oplevering van DELWAQ voor gebruik binnen de Waterstaat plaatsgehad. Het betrof voornamelijk de toepassing gekoppeld aan het toenmalige WAQUA programma voor de hydrodynamica.

Deze koppeling is frequent gebruikt voor de eerste generatie MANS-modellen en ook voor de modellering van het Benedenrivierengebied, alsmede zijn toepassingen voor slib in de Westerschelde bekend. Met name voor het benedenrivierengebied is een eerste versie van het samennemingstool DIDO gerealiseerd in een afzonderlijk project.

Na de overgang van de belangrijke meerdimensionale hydrodynamische modellen in het SIMONA systeem, zijn in eerste instantie nog geen voorzieningen getroffen om DELWAQ simulaties daar op te laten aansluiten. Dit heeft geleid tot ontwikkeling van ad-hoc programmatuur, toen aansluiting nodig was in het kader van het KSENOS project en tot een aantal voorbereidende activiteiten om tot aansluiting te komen.

De belangrijkste voorbereidende activiteiten voor de aansluiting van DELWAQ op SIMONA hebben bestaan uit:

- het onderzoeken van de mogelijkheid om binnen SIMONA een export van resultaten te krijgen, bruikbaar voor een generieke aansluiting op willekeurige waterkwaliteits en ecologische modellering;
- het opzetten van een eerste aggregatie tool binnen SIMONA;
- het onderzoeken van de mogelijkheid de DELWAQ invoer te structureren naar een SIMONA keyword gestuurde invoerfile.

Tijdens het laatste overleg in dit verband, op 27 april 1995, is de wens geuit de onderdelen nu samen te nemen en te komen tot een werkplan om de uiteindelijke vormgeving te realiseren. Het memo WST 95.016 van ing. M. E. Sileon was hiervoor een belangrijke aanleiding, omdat handelend volgens de lijnen van dit memo, tot een generieke interface van SIMONA gekomen zou kunnen worden, gebaseerd op de SIMONA input processing tools, waar DELWAQ op zou kunnen aansluiten.

Op 8 mei 1995 is aan WL, hierbij mede optredend voor EDS, onder nummer RIKZ/955847, een offerte-aanvraag verstuurd, met betrekking tot een voorstudie 'aansluiting DELWAQ op SIMONA'. Deze voorstudie zou met name antwoord moeten geven op enkele technische vragen die nog zijn blijven liggen en zou duidelijk de keuzen moeten schetsen die nog gemaakt kunnen worden met betrekking tot de feitelijke realisering. De offerte-aanvraag noemt expliciet de punten:

- Op welke wijze kan de SIMONA-preprocessor, uitgaande van het voorstel van ing. M. E. Sileon, gebruikt worden als basis voor de nieuwe DELWAQ preprocessor;
- Op welke wijze kan het beheer en onderhoud voor DELWAQ ten dienste van RWS geregeld worden;
- Hoe ziet het Plan van Aanpak eruit tot een aansluiting van DELWAQ op SIMONA door middel van een uniforme invoerwijze.

Naar aanleiding van het plan van aanpak zou het uitvoeringstraject opgestart moeten kunnen worden met daarin de participatie van de diverse RWS belanghebbenden.

Begin juni is een aanbieding uitgewerkt door de ir. J.J. Noort (EDS) en ir. L. Postma (WL) en verzonden naar ir. P.A. Blokland. Op 20 juni is hiervoor bij opdrachtbon nr. 22951495 opdracht verleend.

Voor u ligt de eindrapportage van de voorstudie DELWAQ op SIMONA.



## 2 Probleemstelling

De koppeling van andere modellen aan de SIMONA modellen in het algemeen, en van DELWAQ in het bijzonder, heeft een aantal aspecten, dat hieronder nader genoemd zal worden. De voorstudie zal met betrekking tot al deze aspecten voldoende conceptueel uitsluitsel geven zodat tot de implementatie overgegaan kan worden.

### *a) Export van waterbewegingsresultaten*

Het betreft hier informatie ten behoeve van bijv. waterkwaliteitsberekeningen. Ook voor een waterkwaliteitsmodel geheel binnen het SIMONA raamwerk, maar met een van WAQUA/TRIWAQ afwijkende oplosmethode, spelen deze aspecten. Export is hier dus niet noodzakelijk bedoeld als export uit SIMONA, maar als export naar schijf van al die informatie die nodig is ten behoeve van verdere waterkwaliteitsberekeningen off-line van de oorspronkelijke waterbewegingsberekeningen.

### *b) Export vanuit de SIMONA structuur/import in DELWAQ*

Hier betreft het daadwerkelijk de aansluiting op producten die (nog) buiten SIMONA staan. Betrof a) meer het 'wat', dit punt betreft ook het 'hoe'.

### *c) Ruimtelijk samennemen van rekenvakken*

Dit betreft de wens bij ecologische modellen om op grovere schematisaties van het gebied over te gaan, maar toch gebruik te maken van de, met het hydrodynamisch model berekende, stromings- en transportgegevens op de grensvlakken van de grotere eenheden.

### *d) Weergave van berekeningsresultaten*

Dit betreft de weergave van resultaten van waterkwaliteitsberekeningen. Wanneer uitgegaan wordt van de naverwerkingsprogrammatuur van het waterkwaliteitsmodel zelf, is dit aspect beperkt tot de inhoud en vorm van de extra informatie die overgedragen moet worden voor weergave. Wanneer naverwerking binnen SIMONA nagestreefd wordt, zal de teruglooding van waterkwaliteitsmodel resultaten een rol spelen.

### *e) Conversieprogrammatuur*

Indien gekozen wordt om de DELWAQ invoer volledig over te laten gaan op de SIMONA keyword gestructureerde invoer, dan moet ook conversieprogrammatuur worden gemaakt om de invoer van de bestaande modellen om te zetten naar de nieuwe invoerstructuur.

*f) Het beheer en onderhoud van het gecombineerde produkt*

Bij aansluiting van verschillende produkten kan er onverhoopt wat fout gaan binnen één van de onderdelen, dan wel in de communicatie tussen de onderdelen. Er moet vanuit gegaan worden dat de gebruiker niet altijd kan bepalen waar iets fout is gegaan. De procedures voor beheer en onderhoud zullen derhalve van dien aard moeten zijn dat de gebruiker zijn probleem kan melden op een centraal punt. Hij moet er van op aan kunnen dat daar bepaald kan worden wat de oorsprong van het probleem is en welke acties ondernomen zullen moeten worden. Indien mogelijk zou de gebruiker slechts met de uiteindelijke oplossing geconfronteerd moeten worden.

## 3 Export van waterbewegingsresultaten voor gebruik door DELWAQ

De export van waterbewegingsresultaten voor gebruik door DELWAQ kent twee elementen. Het conceptuele en het informaticatechnische, of het 'wat' en het 'hoe'. In dit hoofdstuk wordt op beide onderdelen ingegaan.

Met betrekking tot het conceptuele wordt een verband gelegd met de beginselen van de Eindige Volume Methode. Daarna wordt dit uitgewerkt in een beschrijving van de grootheden die nodig zijn voor gebruik in waterkwaliteitsmodellen. Hier komen ook de mogelijke problemen aan de orde. Zij zijn genoemd om in de ontwerp- en realisatiefase van de software rekening te houden met nuttige tests.

Met betrekking tot de technische realisatie worden de structuren van binaire files genoemd en wordt ingegaan op de generatie van de SIMONA keyword gestructureerde DELWAQ invoerfile.

De conversie van Lagrangiaanse verplaatsingen naar invoer voor DELWAQ wordt in dit project niet meegenomen.

### 3.1 De grootheden afkomstig van de waterbewegingsberekening

#### 3.1.1 Algemeen

DELWAQ gebruikt de zogenaamde eindige volumemethode voor het oplossen van de ruimtelijke advection-diffusievergelijking. Deze methode is een bijzondere vorm van de meeste gangbare numerieke technieken. Ze ontstaat door de eindige differentie vergelijkingen van deze numerieke technieken aan beide zijden te vermenigvuldigen met combinaties  $\delta x$ ,  $\delta y$ ,  $\delta z$  en/of  $\delta t$  zodanig dat deze uitgedrukt gaan worden in VOLUME, DEBIET per tijdstap en MASSA stof (zowel aanwezig als verplaatst).

In principe is dit voor iedere eindige differentiemethode mogelijk. Hogere orde nauwkeurige methoden ontstaan doordat in de resulterende VOLUME, DEBIET en MASSA termen, waterstanden, snelheden en concentraties op verschillende punten van het ruimtelijk grid voor kunnen komen. Afhankelijk van het aantal punten voor 1 vergelijking, wordt gesproken van een n-punts stencil. DELWAQ staat momenteel maximaal een 5 punts stencil toe in iedere modelrichting.

Massabehoud ontstaat nu door 3 eigenschappen, die alle drie aanwezig dienen te zijn:

- 1) De resulterende stoftransport vergelijking uitgedrukt in VOLUMINA, DEBIET en MASSA dient dimensioneel correct te zijn en geen andere termen meer te bevatten waarin de dimensies lengte, tijd of massa stof voorkomen.
- 2) Door in de stoftransportvergelijking een concentratie 1.0 overal in het grid in te vullen, moet een dimensioneel consistente behoudsvergelijking voor de watermassa zelf ontstaan. Deze vergelijking dient identiek te zijn aan de vergelijking die ontstaat door de onderliggende hydrodynamische continuïteitsvergelijking in eindige volume notatie te schrijven.
- 3) Door de eindige volume vergelijkingen voor alle eindige volumina op te tellen, dienen slechts het totale VOLUME, de totale MASSA en het DEBIET over de open randen over te blijven. (Wat een rekenvak inkomt moet gelijk zijn aan wat uit één of meer andere rekenvakken uitgestroomd is gedurende dezelfde tijdstap).

### 3.1.2 Basisgrootheden

Vanwege eigenschap 2 verlangt DELWAQ vanuit het hydrodynamisch model de termen die ontstaan door het hydrodynamisch model in eindige volume notatie te schrijven. Dit zijn de volgende grootheden:

- a) VOLUMINA, zijnde de hoeveelheden water die aanwezig zijn in iedere gridcel op de integratie tijdstippen zelf;
- b) FLOWS, zijnde de debieten tussen 2 integratie tijdstippen;
- c) AREAS, zijnde de dwarsdoorsneden waarover de FLOWS plaats hadden tussen 2 integratietijdstippen in;
- d) LENGTHES, zijnde de afstanden tussen de segment middens en de AREAS;
- e) Grid administratie (In DELWAQ gespecificeerd per uitwisselingsoppervlak of AREA, in een VAN segmentnummer, een NAAR segmentnummer en een VAN-1 segmentnummer en een NAAR+1 segment nummer vanwege het 5-punts stencil.);
- f) Overige gegevens.

Zo dienen a) en b) consistent te zijn met elkaar in de zin dat iedere 2 opvolgende VOLUMINA in de tijd uit elkaar af te leiden zijn door het DEBIET in de tussentijd, vermenigvuldigd met het tijdsverschil, toe te passen. Een complete set bestaat voor een getij bijvoorbeeld uit n-FLOW records, met n het aantal stappen binnen het getij, en uit n+1 VOLUME records, die deze debieten omsluiten.

Binnen WAQUA en TRIWAQ worden FLOWS aangemaakt die aan deze voorwaarde voldoen, mits de VOLUMINA correct worden afgeleid. Deze opzet maakt het ook mogelijk meerdere tijdstappen samen te nemen. Hiervan zal voor de koppeling gebruik worden gemaakt.

Voor een ideaal cyclisch getij zijn het 1e en het n+1e VOLUME record aan elkaar gelijk. Als dat niet zo is (wat in de natuur het meest voorkomt, omdat er dood-tij spring-tij cycli zijn en nog enkele effecten met afwijkende perioden), wordt in DELWAQ gesproken van een SLUITFOUT. Dit wordt pas een massabalans fout wanneer het hydrodynamisch getij herhaald gebruikt wordt voor waterkwaliteitsberekeningen. DELWAQ is in staat voor deze sluitfout te corrigeren. Daartoe moet DELWAQ de beschikking hebben over zowel het 1e als het n+1e VOLUME record.

De AREAS en LENGTHES worden samen met een dispersiecoëfficiënt gebruikt om een dispersieve debietterm in de vergelijking af te leiden. Consistentie met het hydrodynamisch model is hier niet van belang, tenzij in het hydrodynamisch model ook de stoftransport vergelijking wordt opgelost, om stratificatie te berekenen. Dan dient de DELWAQ dispersie-term identiek te zijn aan de WAQUA/TRIWAQ dispersieterm om de effecten van de stratificatie ook in de waterkwaliteitssimulatie tegen te komen.

Het onderscheid in van- en naar- lengtes speelt een rol bij hogere orde schema's of grids met uiteenlopende grid afmetingen per gridcel. De betekenis van een administratie van de ligging van het grid is evident. De feitelijke ligging van het grid in wereldcoördinaten is in DELWAQ niet van belang en niet beschikbaar, maar speelt wel een rol bij de weergave van het model grid (ook in DIDO dus) en van de modelresultaten.

De overige gegevens betreffen de lokatie en het debiet van lozingspunten, history punten en mogelijke grootheden die om andere redenen van belang kunnen zijn, zoals het horizontaal oppervlak van de cellen, Chezy waarden, ruimtelijk variërende winden, evt. door WAQUA/TRIWAQ uitgerekenende zoutgehalten of temperaturen, dispersiecoëfficiënten die in TRIWAQ zijn toegepast en gegevens over permanent dichte schotten.

### 3.1.3 Enkele bijzondere voorwaarden

DELWAQ accepteert geen negatieve VOLUMINA. Dit lijkt triviaal, maar is het niet. Wiskundig gezien kan volgens eerdere definitie een massabehoudend schema opgetuigd worden waarin negatieve volumina voorkomen. In feite heeft WAQUA/TRIWAQ zo'n schema, omdat de continuïteit ten opzichte van een referentievlak wordt uitgerekend en niemand verbiedt een waterstand tot beneden een referentievlak te dalen. WAQUA/TRIWAQ bezien alleen het fysieke volume in de droogvalprocedure. Deze moet dus zo zijn gekozen dat negatieve volumina niet voorkomen.

DELWAQ accepteert geen negatieve AREAS. Hiervoor geldt het zelfde als voor de VOLUMINA.

Het nieuw te ontwikkelen koppelprogramma moet controleren op het eventueel voorkomen van negatieve volumina en/of doorstroomoppervlakken. Optreden van negatieve volumina en/of doorstroomoppervlakken zal resulteren in een foutmelding.

Deze voorwaarden zijn gecombineerd met de voorwaarden voor massabehoud. Als dus een cel is drooggevallen, moet het kleine positieve rust-volume, massabehoudend tot stand zijn gekomen, anders is in een grafische weergave van stoftransportresultaten ogenblikkelijk een concentratiesprong te zien. Hetzelfde geldt voor het weer onderlopen van het rekenvak.

### 3.1.4 Redundantie

In principe is het mogelijk uitsluitend met de FLOW file en met 1 VOLUME record de DELWAQ simulaties te doen, omdat alle opvolgend VOLUMES op grond van de massabehoudsregels uit de voorgaande en uit de FLOWS af te leiden zijn. DELWAQ heeft hiervoor ook een optie, die 'Computed Volumes' heet. Gezien het grote aantal te verwachten aanloopproblemen bij de koppeling van WAQUA/TRIWAQ en DELWAQ simulaties, wordt echter ten sterkste geadviseerd van deze optie geen gebruik te maken en alle volumina gewoon als file toe te leveren. Dat geeft bij problemen de mogelijkheid te checken waardoor de problemen veroorzaakt zijn.

### 3.1.5 Mogelijke problemen in de praktijk

#### Niet voldoen aan de specificaties

Op zich lijkt dit niet iets om hier te noemen. Toch komt het vaak genoeg voor dat door de setting van een iteratie parameter, een setting van de minimale diepte waar beneden van droogval sprake is, of andere oorzaak sprake is van een negatief volume of een negatieve dwarsdoorsnede.

In het verleden was sprake van een niet sluitende massabalans door het doordifferentiëren van de gradiënt van het debiet in de rekenrichting en de numerieke wijze van oplossen van deze term

$$\left( \frac{\partial(hu)}{\partial x} \right)$$

Een hele andere vorm bestaat uit implementatiefouten van de koppelingsroutines. Deze zijn waarschijnlijk, omdat er veel verborgen aspecten een rol spelen. Zo kan de ligging van het gestaggerde grid aanleiding geven tot fouten. Welke richting loopt het hardst, welke richting is positief. Ook bij de tijd staggering moet geanalyseerd worden welke informatie op welk tijdstip geldig is voor welke periode. Een deel van deze aspecten is al opgelost in de voorbereidende programmatuurontwikkeling tot heden. Het is echter niet uitgesloten dat zich nog iets voordoet.

De ietwat curieuze definitie uit het ad-hoc programma voor KSENOS is daarvan een voorbeeld. De debieten met tijdslabel x hebben gefunctioneerd tot tijdstip x en op dit tijdstip gaan de volgende debieten functioneren die met label y in de file staan. DELWAQ neemt aan dat de debieten met label x beginnen te functioneren op tijdstip x, totdat DELWAQ een record met tijdstip y tegenkomt, waarna de debieten met label y beginnen te functioneren.

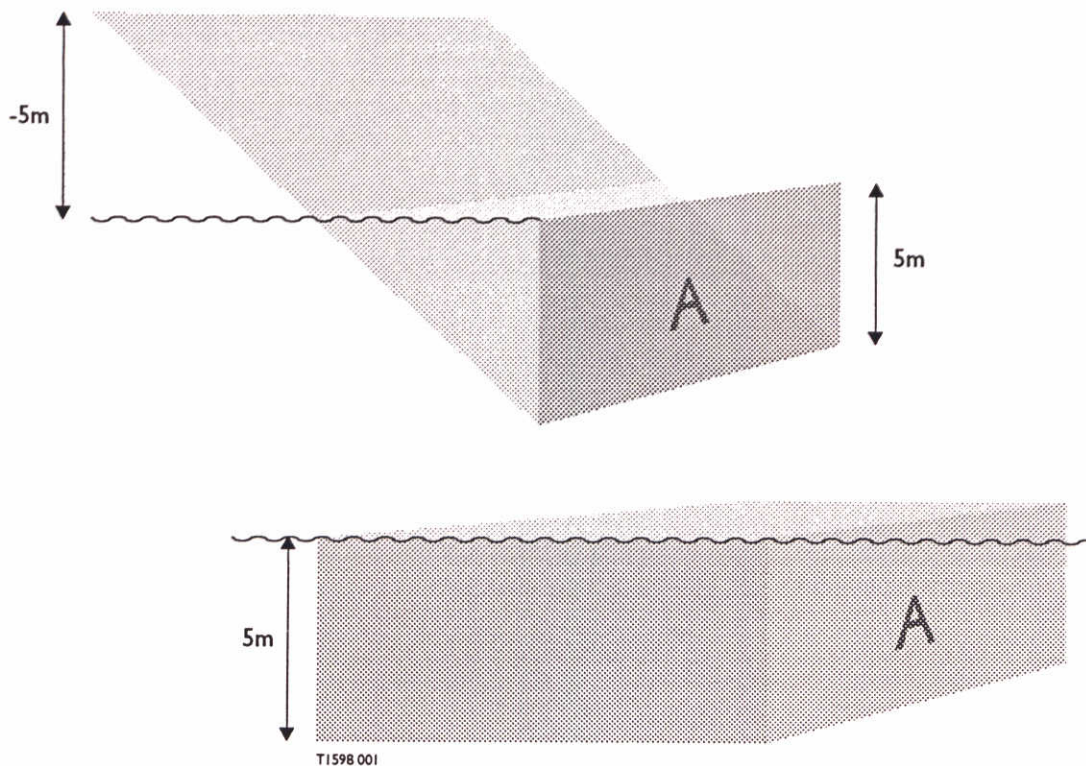
#### Gebiedsgrenzen door droogval

Wanneer de gebiedsschematisatie vorm krijgt door het wel of niet onderlopen van segmenten, ook bij steilere kanten, ontstaat een situatie die het beste geïllustreerd wordt met Figuur 3.1.

Het segment volume is bijna nul. Door een grote dwarsdoorsnede aan de natte kant, ontstaat een groot dispersief debiet en de expliciete schema's binnen DELWAQ raken instabiel.

#### Overige stabiliteitsproblemen

De expliciete schema's in DELWAQ raken instabiel bij transport-Courant getallen  $> 1$ . Door lokaal zeer kleine vakjes te nemen op een kromlijngig grid dan/wel door grotere dispersie-coëfficiënten kunnen instabiliteiten optreden. Voor het testen van dit verschijnsel bestaan ad-hoc tools, die in de beschouwing van dit project nog niet betrokken zijn.



Figuur 3.1 Droogval bij verschillende wijzen van schematiseren

### 3.2 De fysieke aanmaak van de DELWAQ invoerfiles

Een belangrijke keuze die gemaakt moeten worden ten aanzien van de SIMONA keyword-gestructureerde invoerfile voor DELWAQ, is dat niet alle informatie vanuit de WAQUA/TRIWAQ simulatie via de invoerfile DELWAQ zal bereiken. De oorzaak hiervan ligt in het feit dat de SIMONA PRE-Processor (SIPREP) een afbeelding in het computergeheugen maakt van de complete invoer. Zou de waterbeweging als zodanig via de invoerfile worden aangeboden, dan kan voor berekeningen op een fijner grid, een afbeelding in het computergeheugen ontstaan van 100 Mb of meer. De meeste computersystemen verzetten zich hier tegen.

Anderzijds blijft de wens bestaan om alle gegevens in ASCII-formaat ter beschikking te hebben. Deze wens komt met name voort uit de behoefte om de gegevens tussen verschillende computersystemen te kunnen uitwisselen.

Er is gekozen om beide mogelijkheden te implementeren binnen het koppelingsprogramma:

- 1) Een deel van de informatie wordt opgeslagen in de vorm van binaire files. Ze bevat steeds records met een integer voor het aangeven van de tijd en vervolgens reals die het overgedragen item bevatten op dat tijdstip. Er is in de files geen informatie aanwezig die specifiek voor DELWAQ zou zijn en voor anderen niet-buikbaar of niet-werkbaar geacht zouden mogen zijn.

- 2) Alle informatie wordt opgeslagen in ASCII-formaat.  
Met handhaving van dezelfde file-structuur als die van de binaire files, maar dan in ASCII-formaat, gestructureerd met keywords, deze files worden vervolgens via een include in de modelfile opgenomen.

De resulterende set files van de interface wordt in de volgende hoofdstukken nader beschreven. Hierbij wordt uitgegaan van de optie, waarbij de bestanden in binair formaat worden weggeschreven.

### 3.2.1 De invoerfile

Dit is in de oude vorm een ASCII file volgens DELWAQ voorschrift. In de nieuwe vorm wordt dit een file volgens SIMONA voorschrift. Er wordt verwezen naar de bijlage en hoofdstuk 3.3 voor een gedetailleerde beschrijving van deze invoerfile. In dit hoofdstuk zal alleen de variabele informatie geschetst worden die, vanuit een WAQUA/TRIWAQ simulatie, overgedragen zal moeten worden via de invoerfile om succesvol een waterkwaliteitsberekening op te zetten zonder verdere tussenkomst van de gebruiker (de zogenaamde vliegende start). Daarna kan de gebruiker de gegenereerde invoerfile aanpassen.

- 1) Modelidentificatie  
DELWAQ heeft hiervoor 4\*40 karakters maximaal aan ruimte
- 2) Model timers  
DELWAQ verwacht een start- en stoptijd en een tijdstapgrootte. Voor de gebruiker is het gerieflijk wanneer de SIMONA file voor DELWAQ in ieder geval de start- en stoptijd en de tijdstap van de weggeschreven hydrodynamische files te zien geeft. De gebruiker kan deze altijd nog zelf wijzigen.  
Voor de uitvoer is ook een aantal timers vereist, hiervoor zouden in aanzet de simulatie timers kunnen worden geschreven.  
Hoewel momenteel nog niet door DELWAQ gebruikt, dient ook de referentietijd overgenomen te worden.
- 3) Monitoring punten  
In WAQUA/SIMONA heten deze punten wellicht History punten. Voor consistentie is het belangrijk dat de koppelingsprogrammatuur de hydrodynamische history punten naar naam en lokatie in de DELWAQ invoer file vermeldt, zodat default dezelfde punten worden gebruikt.
- 4) Aantal rekenvakken  
Dit is zoiets als MNMAXK wanneer DELWAQ één op één gebruik maakt van het WAQUA/TRIWAQ rooster, anders levert DIDO de waarde voor NOSEG toe.
- 5) De volumina  
Het betreft hier in de regel een binaire file, waarvan slechts de file naam hoeft te worden overgenomen. Voor de inhoud van de file, zie onder 3.2.2



- 6) **Het aantal uitwisselingen**  
Dit is zoiets als 2\*MNMAXK of 3\*MNMAXK wanneer één op één wordt gerekend. DIDO levert een NOQ1, NOQ2 en NOQ3 op.
- 7) **De van, naar, van-1, naar+1 pointer file**  
Dit is in de regel een binaire file, waarvan alleen de naam hoeft te worden overgenomen. De inhoud van de file wordt in 3.2.3 nader toegelicht.
- 8) **Dispersiecoëfficiënten (optioneel)**  
Alleen wanneer evt. in WAQUA/TRIWAQ gebruikte dispersiecoëfficiënten overgenomen dienen te worden, moeten ze worden genoemd. Het betreft dan in de regel een binaire file, waarvan hier alleen de naam hoeft te worden vermeld. Voor de inhoud van de file wordt verwezen naar 3.2.4.
- 9) **Dwarsdoorsneden**  
Het betreft hier in de regel een binaire file, waarvan slechts de file naam hoeft te worden overgenomen. Voor de inhoud van de file, zie onder 3.2.5.
- 10) **Debieten**  
Het betreft hier in de regel een binaire file, waarvan slechts de file naam hoeft te worden overgenomen. Voor de inhoud van de file, zie onder 3.2.5.
- 11) **Van- en naar lengtes**  
Het betreft hier in de regel een binaire file, waarvan slechts de file naam hoeft te worden overgenomen. Voor de inhoud van de file, zie onder 3.2.6 Wanneer DIDO wordt gebruikt, maakt DIDO deze file aan.
- 12) **Lozingen**  
De lokaties en namen van lozingen die aan WAQUA/TRIWAQ bekend waren, alsmede de (tijdreeksen van) debieten die in WAQUA/TRIWAQ zijn gebruikt, dusdanig, dat het lozingsdebiet onderdeel uit maakt van de massabehoudende set debieten voor het rekenvak waarin het debiet uitkomt.
- 13) **Overigen**  
De Chezy waarden, ruimtelijk afhankelijke winden en de evt. door WAQUA/TRIWAQ berekende zout- en/of temperatuurwaarden zijn niet essentieel voor een eerste DELWAQ simulatie. De gebruiker kan er echter de beschikking over willen hebben. Deze worden in extra files toegeleverd met een structuur die in 3.2.2 wordt gegeven.

In principe is het mogelijk een template van een SIMONA invoerfile voor DELWAQ te maken, waarin bovengenoemde 13 items (waarvan 6 slechts bestaan uit het invullen van een file-naam) ingevuld worden op de plek waar de tekens @1 t/m @13 staan o.i.d.

Een andere mogelijkheid is het wegschrijven van de volledige keyword gestructureerde DELWAQ invoerfile door het koppelprogramma. Deze laatste mogelijkheid staat wat minder flexibel toe, dat de layout en informatie van de file wordt veranderd op punten die voor WAQUA/TRIWAQ niet van belang zijn.

Welke van de twee opties gekozen wordt, het verdient aanbeveling de file zo in te richten dat 1 stof wordt gedefinieerd die 'continuïteit' heet. Dat voor alle open randen deze stof 100.0 als constante concentratie meekrijgt en dat deze stof voor alle lozingen ook 100.0 als concentratie meekrijgt en 100.0 als beginvoorwaarde. Wanneer ook de overige elementen van de keyword gestructureerde DELWAQ invoerfile correct zijn, is de gebruiker in staat, zonder aanvullende handelingen, direct na een WAQUA/TRIWAQ simulatie en het draaien van het koppelingsprogramma, DELWAQ te draaien en te controleren of gedurende de hele simulatie periode de concentratie 100.0 blijft op alle lokaties. Deze uitgangspositie is heel belangrijk als vliegende start bij iedere nieuwe applicatie.

### 3.2.2 De VOLUMES file

Voor DELWAQ is de volumes file een binaire- (PC) of een unformatted (UNIX) file met records die bestaan uit 1 integer die de tijd aangeeft in seconden (daarmee is 68 jaar te omspannen) en NOSEG real\*4 waarden, die de volumina op dat tijdstip aangeven. Het aantal records is gelijk aan het aantal tijdstappen plus 1. Bij 'computed volumes' volstaat 1 record. Bij steady state berekeningen zijn 2 records nodig voor sluitfout correctie.

### 3.2.3 De Van, Naar pointer tabel

Dit is een binaire- (PC) of een unformatted (UNIX) file, met 3 records.

Deze bevatten NOQ1\*4 integers, NOQ2\*4 integers en NOQ3\*4 integers. NOQ1, NOQ2 en NOQ3 zijn de aantallen uitwisselingen in de drie richtingen. De index over de 4 waarden (van, naar, van-1, naar + 1) loopt het snelst. Wanneer één van de NOQs gelijk is aan 0, dient het bijbehorende record te ontbreken ! Een loos record is dus niet toegestaan.

In principe schrijft DIDO deze file.

### 3.2.4 Een optionele dispersie file

Dit is een binaire- (PC) of een unformatted (UNIX) file, met records die bestaan uit 1 integer en (NOQ1+NOQ2+NOQ3) real\*4 waarden voor de dispersiecoëfficiënten (in m<sup>2</sup>/s). Zie verder onder 3.2.1.

Bij aanwezigheid van 1 record neemt DELWAQ aan dat de coëfficiënten constant zijn. Bij aanwezigheid van meerdere records neemt DELWAQ een blok-functie aan die cyclisch herhaald wordt indien nodig.

### 3.2.5 Een dwarsdoorsnede- of debieten file

Dit is een binaire- (PC) of een unformatted (UNIX) file, met records die identiek zijn aan die als beschreven onder 3.2.4, maar dan met de uitwisselingsoppervlakken in m<sup>2</sup> of het debiet in m<sup>3</sup>/s in plaats van de dispersiecoëfficiënten.

### 3.2.6 Een van-naar lengtes file

Deze file is wat structuur betreft eender aan de file genoemd onder 3.2.4, met dien verstande dat 2\* zoveel reals in het record staan, omdat (NOQ1+NOQ2+NOQ3) paren van- en naar lengtes worden verwacht. In principe schrijft DIDO deze file.

### 3.3 Gebruik van de SIMONA input file voor DELWAQ

De SIMONA input file is beschreven in de "Programmer's guide SIMONA". Voor dit rapport is gebruik gemaakt van versie 1.25 van 15 maart 1995. Ook van WL-zijde is deze handleiding goed doorgelezen om de consequenties voor de aansluiting van DELWAQ op SIMONA in kaart te brengen. Het is echter erg waarschijnlijk dat niet alle merites door WL te doorgronden zijn met het lezen van de handleiding alleen. De draagwijdte van een aantal aspecten wordt pas duidelijk bij het gebruik. Dit geeft een ingebouwde onzekerheid, waarvan in dit project is geprobeerd die te minimaliseren.

Van EDS-zijde is na analyse bevestigd dat het mogelijk is om met behulp van de algemene pre-processor invoerbeschrijving van WST95.016 door SIPREP te laten inlezen. Hiervoor is de definitie van een referentietabel noodzakelijk. Met behulp van de bijbehorende toolbox is het vervolgens mogelijk om de ingelezen data op te halen en te interpreteren.

Binnen SIMONA zijn routines beschikbaar, die de tijdreeksen uit de invoer interpreteren en verwerken. Tijdens de voorstudie is gebleken dat deze routines niet zijn beschreven in de SIMONA Programmer's Guide.

Voor gebruik van deze subroutines binnen DELWAQ zijn een tweetal uitbreidingen noodzakelijk:

- De mogelijkheid om de tijdreeksen cyclisch te definiëren;
- De mogelijkheid om blokfuncties te kunnen definiëren.

In dit hoofdstuk zal verder ingegaan worden op de algemene aspecten verbonden aan het aanpassen van de DELWAQ1 invoer processor aan het gebruik van SIPREP. Vervolgens zal ingegaan worden op de voorstellen van ing. M. E. Sileon met betrekking tot de vorm en inhoud van de SIMONA input file voor DELWAQ.

#### 3.3.1 Gebruik van SIPREP

Er wordt van uitgegaan dat er een aparte versie van DELWAQ1 wordt geschreven, die in plaats van de DELWAQ invoerfile, de SIMONA input file voor DELWAQ inleest. Dit houdt in dat in deze versie van DELWAQ1 de SIPREP routine aanroept die een input buffer vult met de gegevens uit de input file. Vervolgens maakt deze versie van DELWAQ1 dan gebruik van die routines uit de SIMONA bibliotheek, waarvan de namen met SIGT en SIGF beginnen om de gegevens uit de input buffer op te vragen.

Op zich zou het een eenvoudige actie lijken om in een speciale versie van DELWAQ1 de FORTRAN READ statements te vervangen door CALLS naar de SIMONA bibliotheek om de gegevens binnen te krijgen en vervolgens de normale DELWAQ1 afhandeling daarop toe te passen. Dit is echter iets te eenvoudig gezien.

De SIMONA bibliotheek bevat basisfuncties. Alle intelligentie moet met het aanroepende programma gerealiseerd worden. Als voorbeeld kan gebruikt worden voorbeeld 1 op blz. 17 van Bijlage A (men moet zich realiseren dat BOX-functies niet werken op een onregelmatig grid).

- Opgevraagd moet worden of GLOBAL voorkomt bij het onderdeel FLOWS. Dat is hier  
blijkbaar niet het geval. Zo ja:
  - Opvragen of CONST\_VALUES voorkomt bij dit onderdeel. Zo ja, dan de  
waarde inlezen, het array vullen.
  - Opvragen of LOCAL voorkomt. Zo ja:
    - òf
      - \* Loop over het aantal uitwisselingen en met ISEQ=loopvariabele, VALUES  
opvragen. Komt er een value terug, dan het array op die plaats updaten.
    - òf
      - \* Array met ISEQ waarden opvragen
      - \* Array met VALUES waarden opvragen en het array met flows updaten.
  - Klaar
  - Opvragen of VARIABLE\_VALUES voorkomt bij dit onderdeel. Zo ja, de array  
opvragen, checken of die even lang is als het totaal aantal uitwisselingen.
  - Klaar
- Opgevraagd moet worden of TIMESERIES voorkomt bij het onderdeel FLOWS. Zo ja,  
dan is er een tijdserie. Het keyword TIME\_FUNCTIONS is in principe overbodig,  
evenals TS.
  - òf
    - In een loop over het aantal uitwisselingen (elders opgevraagd), moet gekeken  
worden naar de waarde van SERIES.
    - Als SERIES='regular', moeten de 9 waarden van FRAME opgevraagd worden.  
Deze moeten omgezet worden in een array met tijden, van nog uit te rekenen  
lengte (7 in dit geval).
      - \* De 7 waarden van VALUES moeten opgevraagd worden in het bijbehorende  
array.
    - Als SERIES='irregular', moet in een loop de 4 waarden van TIME\_AND\_VALUES  
worden ingelezen voor een steeds groter sequence nummer. Wanneer geen  
waarden meer terug komen is de reeks ten einde. De eerste 3 waarden moeten  
steeds in een DELWAQ tijdsaanduiding worden omgezet.
    - Als SERIES geen waarde heeft gekregen, dan staat dat sequence nummer blijkbaar  
in een ander blok.
  - òf
    - Een array met waarden van ISEQ wordt opgevraagd.
    - In een loop over het aantal voorkomens van ISEQ de waarde van SERIES opvra-  
gen en afhankelijk daarvan handelen als boven. SERIES heeft nu altijd een  
waarde.
- Opgevraagd moet worden of FOURIER voorkomt. Zo ja:
  - Array met ISEQ waarden opvragen
  - Voor ieder van deze ISEQ waarden de AZERO, AMPL, OMEGA en PHASE  
opvragen en uit het antwoord moet steeds het aantal harmonischen afgeleid  
worden.

Alle tests, of er genoeg gegevens toegeleverd zijn, of de gegevens kloppen etc. moet door de applicatie worden gedaan.

Alle opvragingen moeten geschieden door een array met levels te vullen die het pad beschrijft in de referentietabel. De bovengenoemde keywords komen als zodanig dus niet in de source code voor.

In feite heeft SIPREP alleen het leeswerk zelf verricht en geconstateerd of alle keywords die als verplicht waren aangemerkt, ook aanwezig waren. De bibliotheek stelt in staat de gegevens op te vragen, zoals deze in de file staan. De interpretatie, zelfs van datum en tijd, is aan het programma dat de gegevens opvraagt.

Dit houdt in dat het schrijven van een aangepaste versie van DELWAQ1 een substantiële hoeveelheid werk met zich brengt. Deze hoeveelheid werk kan gereduceerd worden wanneer de keyword gestructureerde invoer file nauwer aansluit bij de DELWAQ invoer file. Dit kan door kwistig gebruik te maken van MATRIX vormen van inlezen, zoals in paragraaf 3.3.8 als voorbeeld aangegeven voor lozingen. Het nadeel daarvan is echter dat een deel van de flexibiliteit wordt opgegeven. In het onderhavige voorbeeld wordt er bijvoorbeeld van uit gegaan dat voor alle stoffen een geloosde concentratie wordt gegeven, zodat het keyword voor de stof kan vervallen.

In zijn algemeenheid is een structuur waarin matrices ingelezen worden in de zelfde volgorde waarin dat in DELWAQ gebeurt, met zo min mogelijk keyword sturing, een structuur die het werk aan de DELWAQ zijde minimaliseert. Zelfs dan echter, als de structuur van de input file dicht tegen die van DELWAQ aanligt, zullen er toch fundamentele verschillen zijn. Deze vloeien voort uit het feit dat DELWAQ sequentieel de invoerfile doorleest en daarin switches kan tegenkomen die een rol spelen bij de verdere verwerking.

SIMONA kent geen volgorde in de aangeleverde gegevens in de invoerfile voor de verschillende keywords. Binnen SIPREP in combinatie met de referentietabel, is een beperkte hoeveelheid aan controles mogelijk. In veel gevallen moet een aantal extra tests in de modelafhankelijke pre-processor worden opgenomen.

In het werkplan worden 2 opties gegeven:

- Aanmaak van een aangepaste versie van DELWAQ1 op basis van een flexibele structuur;
- Analyse van de Input file met het oogmerk het werk voor DELWAQ1 te minimaliseren ten koste van de flexibiliteit en het aanmaken van een daaraan aangepaste versie van DELWAQ1.

In het volgende hoofdstuk is het voorstel voor een opbouw van de invoerfile van ing. M. E. Sileon gezien op zijn inhoudelijke merites en is NIET de genoemde verstarring ten behoeve van minimalisering van DELWAQ werkzaamheden beschouwd.

### 3.3.2 De beschrijving van de input file

Een definitie van een mogelijke DELWAQ invoerfile in SIMONA keyword structuur is gegeven door ing. M.E. Sileon in WST 95.016. De inhoud van dat stuk is als Bijlage A aan dit rapport toegevoegd.

In het kader van dit project is de betreffende definitie aan een nauwkeurig onderzoek onderworpen en zijn enkele opmerkingen en kanttekeningen geplaatst. Het stuk WST 95.016 is tezamen met de hier gemaakte kanttekeningen een volledige basis om te komen tot een SIMONA referentie tabel, die de DELWAQ invoerfile in SIMONA keyword structuur definieert.

In deze bespreking van WST 95.016 wordt de volgorde van de DELWAQ invoer file aangehouden, zodat gegarandeerd wordt dat alle daarvoor benodigde elementen via SIPREP uit de SIMONA versie van deze invoer file zijn te halen. Bij alle punten wordt echter verwezen naar het pagina nummer uit WST 95.016, zodat het item ook in dat stuk eenvoudig is terug te vinden. Het merendeel van de opmerkingen heeft betrekking op implementatie voorkeur die op bepaalde punten vanuit het DELWAQ beheer bestaat. Soms worden ook enkele suggesties gedaan, die wellicht de handzaamheid vergroten, zonder dat ze nodig zijn voor een implementatie. Het enige verder strekkende wijzigingsvoorstel heeft betrekking op de invoer van tijdreeksen.

In de bespreking van WST 95.016 wordt uitgegaan van de DELWAQ invoer zoals deze met release 4.2 bestaat. Er zijn plannen de invoer anders te structureren. Met het hier gestelde moet het mogelijk zijn de invoer van release 4.2 te realiseren. Daar waar gedachten bestaan over andere invoer opties zal geanticipeerd worden. De invoer van het huidige DELWAQ 4.2 staat echter centraal.

### 3.3.3 Volgorde

#### *Algemeen:*

Het is de bedoeling om in de toekomst de volgorde van items in de DELWAQ invoerfile volledig vrij te laten. Op zich verdraagt zich dat goed met een inlezen via SIPREP, omdat SIPREP eerst alle invoer in core inleest en er vervolgens random door subroutine aanroepen met DELWAQ uit gelezen kan worden. In die zin is goed met het voorstel te werken.

Men zou zich kunnen afvragen of ook voor RWS gebruikers een volledig vrije invoer interessant kan zijn. Binnen SIMONA is de volgorde vrij binnen een blok, de blokken moeten echter wel per blok afgewerkt worden (zoals nu ook in DELWAQ). Men kan zich indenken de SIMONA invoerfile voor DELWAQ slechts uit 1 blok te laten bestaan met een vrije volgorde van onderdelen.

Dit zou dan een hele laag van keywords overbodig maken, zoals: IDENTIFICATION, MESH, FLOW, TRANSPORT, DISPLAYS, SDSOUTPUT en PRINTOUTPUT.

In het algemeen lijkt de gebruiker gediend met een kleine verzameling zeer krachtige keywords. In dit verband kan men zich afvragen of er in de tweede laag wellicht ook niet een aantal achterwege kan blijven, zoals bijvoorbeeld COMPARTMENTS, EXCHANGES, PROBLEM.

Op zich zou het eenduidig genoeg zijn als de invoerfile er uit zien volgens voorbeeld 2. Hierbij wordt overigens wel aangenomen dat bijv. het onderdeel CONSTITUENTS volledig afgewerkt wordt nadat het keyword er staat. Voor EXCHANGES geldt hetzelfde. Het is een keuze om de sequentie integer wel of niet op te geven.

### Voorbeeld 2: Invoerfile met minder keywords

```
NOCELL = 2356
#
#           nr      stofnaam      eenheid
CONSTITUENTS      1      'Salinity'      '0/00'
CONSTITUENTS
#           2      'Nitrate'      'mg/l'

SYSTEMTIMER = 'seconds'
# langs.  dwarsr.  vertikaal
MEXCH = 2317  NEXCH = 1512  KEXCH = 0
#           in matrix formaat
#           nr      van      naar      van-1  naar+1
EXCHANGES=      1      -1      8        9        10
#           2        8        9        10       11
#           .        .        .        .        .
#           3829     2342     -312     2136     -312
```

### Voorbeeld 3: Invoerfile volgens voorbeeld

```
NOCELL = 2356
#
#           nr      stofnaam      eenheid
CONSTITUENTS      1      'Salinity'      '0/00'
CONSTITUENTS
#           2      'Nitrate'      'mg/l'

SYSTEMTIMER = 'seconds'
# langs.  dwarsr.  vertikaal
MEXCH = 2317  NEXCH = 1512  KEXCH = 0
#           in keyword formaat volgens voorstel
#           van      naar      van-1  naar+1
EXCHANGES
SECTION      1      : CEL= -1 CEL= 8 CEL= 9 CEL= 10
SECTION      2      : CEL= 8 CEL= 9 CEL= 10 CEL= 11
#           .        .        .        .        .
SECTION      3829 : CEL=2342 CEL=-312 CEL=2136 CEL=-312
```

### Voorbeeld 3: Invoerfile voor een lagere orde schema

```
NOCELL = 2356
#
#           nr      stofnaam      eenheid
CONSTITUENTS      1      'Salinity'      '0/00'
CONSTITUENTS
#           2      'Nitrate'      'mg/l'

SYSTEMTIMER = 'seconds'
# langs.  dwarsr.  vertikaal
MEXCH = 2317  NEXCH = 1512  KEXCH = 0
#           of zelfs voor een lagere orde schema:
EXCHANGES
SECTION      1      : VAN= -1 NAAR= 8
SECTION      2      : VAN= 8 NAAR= 9
#           .        .        .
SECTION      3829 : VAN=2342 NAAR=-312
```

Het is echter aan de toekomstige gebruikers om te beslissen welke vorm plezierig werkt.

### 3.3.4 Modelidentificatie

bij pag. 5.

In DELWAQ is deze beperkt tot 4•40 karakters. Het voorstel spreekt over 40+68+72 karakters. Besloten is om de 4•40 karakters van DELWAQ te handhaven. Voor de koppeling met SIMVIEW is het van belang dat een experimentnaam wordt toegevoegd of dat één van de 4 teksten tot experiment wordt verheven.

### 3.3.5 Actieve en inactieve stoffen

bij pag 9.

Een stofnummer is voor beide stofsoorten in de toekomst niet meer nodig. Voorlopig kunnen ze echter blijven staan. DELWAQ zal stoffen nummeren in volgorde van binnenkomst. Bij toekomstige releases van DELWAQ worden enkele kleine utilities toegevoegd die de gebruiker in staat stellen het stof-nummer van een stof op te vragen in een proces module.

In release 4.2 van DELWAQ zullen alleen de eerste 10 karakters van de stof naam en de eenheid worden gebruikt. In latere releases kan het aantal gebruikte karakters hoger liggen dan de genoemde 20 voor de stofnaam. Voor de eenheid is het onwaarschijnlijk dat meer karakters zullen worden gebruikt.

### 3.3.6 Integratie (en andere) timers

bij pag. 1 en 2

De Auxiliary timer komt te vervallen. De proces timer is een dag. Wanneer mensen zelf routines programmeren moet men rekening houden met de timer van een dag, voor de eigen processen.

Het is waarschijnlijk verstandig om te anticiperen op een structuur waarbij voor ieder blok gegevens waarvoor ook een tijdsas geleverd moet worden eerst een keyword geplaatst wordt wat aangeeft wat de eenheid van tijd is. Als default kan nu de system timer genomen worden en de proces timer voor functies en segment functies. In de toekomst kan dan simpel van het default worden afgeweken.

bij pag. 9

De integratie optie moet voorlopig maar tussen 1 en 20 gelegd worden. Er staan immers nog een aantal integratie opties op stapel en de door RIZA-Dordrecht gebruikte optie voor een impliciete vertikaal is optie 11. De transportoptie is een real die momenteel ligt tussen 0.0 en 7.1, of een integer die ligt tussen 0 en 71. In feite zijn het 2 digits, de eerste tussen 0 en 7 en de tweede 0 (geen balans informatie) en 1 (aanmaken balansen files). Deze tweede optie wordt in het voorbeeld door een apart keyword gedekt en kan dus vervallen.

De te gebruiken integratie optie moet via een keyword worden gedefinieerd b.v.:

```
INTEGRATION = 'implicit_vertical'
```



### 3.3.7 Uitvoer grootheden

#### bij pag 14: Restart.

Wat betreft de restart file neemt DELWAQ aan dat deze op de eindtijd van de simulatie geschreven wordt. De genoemde timers zullen dus niet gebruikt worden. De enige reden om af te wijken van het eindtijdstip zou de vrees kunnen zijn dat door een vollopende schijf een lange berekening halverwege afbreekt. Zodra afgebroken wordt door delingen door nul e.d. moet vrijwel altijd toch de hele run over worden gedaan.

Wanneer er behoefte is aan een restart file die af en toe geupdate wordt, zodat bij een vollopende schijf herstart kan worden in de buurt van het punt van vollopen, dan zou een tijdstap opgegeven moeten kunnen worden. DELWAQ zou dan iedere periode de oude restart file overschrijven en bij een fout zou de meest recente file nog bestaan.

#### bij pag 14 en 15: Uitvoergrootheden.

DELWAQ kent als uitvoermogelijkheden:

- 0 = geen,
- 1 = alle stoffen,
- 2 = alle stoffen plus gespecificeerde andere grootheden,
- 3 = zowel stoffen als andere grootheden expliciet gespecificeerd.

In de voorgestelde vorm is alleen optie 3 voorzien. Dat kan, dat geeft geen problemen.

Het verder genereren van default uitvoer is een moeilijke zaak. Niet zozeer vanwege de stoffen, want dat zou gelijk kunnen zijn aan bovengenoemde optie 1, maar meer wat betreft de uitvoertijdstippen. Wat zou dat moeten zijn? Alle tijdstappen? Dat levert zeer grote files op. Het is wellicht raadzaam de uitvoerspecificatie als verplicht op te nemen, in ieder geval voor de monitoring file. De default zou weliswaar kunnen zijn 'geen uitvoer', maar dat lijkt ook minder zinvol.

### 3.3.8 Tijdreeksen

#### bij pag. 3 en pag. 17

Door invoering van een keyword HARMONICS waarvoor iedere omega gegeven moet worden naast FOURIER met maar 1 basis hoeksnelheid is wellicht een oplossing van het genoemde probleem gegeven.

**bij pag. 17**

Het is opletten bij de configuratie van tijdreeksen. DELWAQ maakt immers duidelijk onderscheid naar het onderwerp van de tijdreeks. Dat lijkt triviale dan het is.

VOLUMINA	Het volume is evt. een tijdsfunctie en mag voor groepen van segmenten opgegeven worden.
DISPERSIONS	De dispersiecoëfficiënt is evt. een tijdsfunctie en mag voor groepen van uitwisselingen opgegeven worden.
AREAS	Dispersieve oppervlakken als met dispersies
FLAWS	Debietten als met dispersies
LENGTHS	Van- en Naar-lengtes kunnen een tijdsfunctie zijn. De paren lengtes mogen voor groepen van uitwisselingen opgegeven worden
RANDVOORWAARDEN	Zijn evt. een tijdsfunctie. Eén randvoorwaarde bestaat uit NOSYS stofconcentraties ! De tijdsfuncties mogen voor groepen van randcellen opgegeven worden.
LOZINGEN	Zijn evt. een tijdsfunctie. Eén lozing bestaat uit NOTOT stofconcentraties ! De tijdsfuncties mogen voor groepen van lozingslocaties opgegeven worden.
FUNKTIES	Mogen in groepen opgegeven worden.
SEGMENTFUNKTIES	Eén segmentfunctie bestaat uit NOSEG waarden. Segmentfuncties mogen in groepen opgegeven worden.

Dit betekent dat bij VOLUMINA, DISPERSIONS, AREAS en FLAWS een tijdreeks steeds bestaat uit  $n*1$  waarden, met  $n$  het aantal segmenten of uitwisselingen wat men in dat blok behandelt. Voor LENGTHS dienen  $n*2$  waarden opgegeven te worden per tijdstip of per harmonische component.

Voor RANDVOORWAARDEN dienen  $n*NOSYS$  waarden opgegeven te worden, dat is dus een matrix ! Voor LOZINGEN is dat  $n*NOTOT$ , dus ook een matrix.

Voor FUNKTIES is dat  $1*n$  ! Dat is een subtiel onderscheid met  $n*1$  !

Voor SEGMENTFUNKTIES zijn dat er  $NOSEG*n$ , wat zich subtiel van  $n*NOSEG$  onderscheidt. De volgorde moet eenduidig vast liggen, maar wat belangrijker is, daar waar matrices opgegeven moeten worden is daar NIET de vrijheid om bijv. per stof of groepen van stoffen een verschillende tijdreeks te kiezen. Dat kan slechts per (groep) randvoorwaarde(n) of per (groep) lozingspunt(en).

Het voorbeeld op pag.17 van de bijlage voor lozingen is dus in het huidige DELWAQ niet te implementeren.

Binnen SIMONA zijn standaard routines voor de verwerking van tijdreeksen gedefinieerd, die een deel van de boven beschreven problematiek kunnen ondervangen. De huidige functionaliteit is voor gebruik binnen DELWAQ echter te beperkt. Er kunnen verschillende tijdreeksen worden ingelezen, ieder met hun eigen frequentie. Deze subroutines maken vervolgens een matrix van deze tijdreeksen aan met alle opgegeven tijdstippen daarin opgenomen. Ontbrekende waarden van de afzonderlijke reeksen worden met behulp van lineaire interpolatie aangevuld. Tevens bevatten de bewerkte tijdreeksen altijd het begin en eindtijdstip van de simulatie. Kortere reeksen worden altijd uitgebreid naar dit interval. Voor DELWAQ zijn de volgende uitbreidingen op deze tools noodzakelijk:

- de mogelijkheid om reeksen cyclisch aan te vullen
- aanvullen van de tijdreeksen ook volgens een blokfunctie laten verlopen.

Voor harmonische functies kunnen de bovengenoemde subroutines niet worden gebruikt, omdat deze functies niet als tijdreeks worden opgeslagen. Indien in een matrix ook een combinatie van blokfuncties en lineaire functies mogelijk moet zijn, moet ook binnen DELWAQ een voorziening worden getroffen.

Een goede stelregel is om voor de SIMONA implementatie t.b.v. DELWAQ de stoffen index het diepst weg te leggen in geneste keywords. Daarna komt het aantal items van dat blok (voorlopig in SIMONA 1, omdat je dat niet kunt groeperen) en vervolgens de tijdreeks. In pag. 17 van de bijlage ligt juist de tijdreeks het diepst, daarna de item index en dan de stof index.

Een voorbeeld is:

```
DISCHARGEVALUES
  ISEQ=1
    SERIES='irregular' BLOCKFUNCTION
#      tijd  1  2  3  4  5  6  7
  TIME_AND_VALUES= 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
                   10.0 10.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
                   30.0 10.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 100.0
                   40.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 100.0
                   45.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
                   60.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

  ISEQ=2
    SERIES='regular'
    FRAME= 0.0 , 10.0 , 60.0
#      1  2  3  4  5  6  7      tijd
  VALUES= 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 # 0.0
           20.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 200.0 # 10.0
           20.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 200.0 # 20.0
           20.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 200.0 # 30.0
           20.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 200.0 # 40.0
           0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 # 50.0
           0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 # 60.0
```

### 3.3.9 Schaalfactoren

bij pag 1.

In het voorstel zijn schaalfactoren niet opgenomen. Deze blijken in de praktijk het meeste bij LOZINGEN te worden toegepast (ug at/l naar mg/m<sup>3</sup>, mg NO<sub>3</sub>/l naar mg N/l). Soms worden ze ook toegepast voor de van- en naar- lengtes (waarden in km, omrekenen naar m.) maar voor koppeling met WAQUA en TRIWAQ zal dat geen rol spelen. Heel incidenteel voor andere grootheden. Ik denk dat RWS de mogelijkheid van schaalfactoren het meest zal missen bij het opgeven van lozingen en randvoorwaarden. Voor de implementatie in DELWAQ is het ontbreken van schaalfactoren geen bezwaar, voor het gebruik van deze preprocessor voor alle verdere DELWAQ toepassingen, wèl.

### 3.3.10 USERDATA\_TRANSPORTS

bij pag 12.

Het betreft hier de constanten, parameters, functies en segment-functies. Het is duidelijker hiervoor de DELWAQ-benaming aan te houden. De WAQUA benaming doet uitsluitend aan fysische grootheden denken.

## 4 Ruimtelijke samenneming van rekenvakken

Het ruimtelijk samen nemen van rekenvakken heeft invloed op alle vormen van gegevens. De vaste grootheden met scalair karakter, zoals het aantal rekenvakken, zal veranderen. Per grootheid zal hierop gedetailleerd worden ingegaan. Voordat dit gebeurt zal echter het algemene principe van de samenneming worden besproken.

Hoewel waarschijnlijk ook de 3e dimensie uitgewerkt zal moeten worden, is dat in deze notitie niet gedaan.

### 4.1 Wijze van samennemen

Er zijn verschillende gradaties van samennemen mogelijk.

#### a) $n \cdot m \cdot k$ of regelmatig samennemen

De eenvoudigste wijze van samennemen bestaat uit het leggen van een nieuw ruimtelijk grid over het aanwezige grid voor hydrodynamische berekeningen. Dit nieuwe ruimtelijke grid heeft in de 3 richtingen gridlijnen die samenvallen met bestaande gridlijnen, maar slechts met iedere n-de, m-de of k-de gridlijn. In beginsel kent de nieuwe waterkwaliteitsschematisatie ongeveer  $MNMAXK / (n \cdot m \cdot k)$  rekenvakken, met MNMAXK het aantal rekenvakken van de oorspronkelijke schematisatie. Ongeveer, omdat de vorm van de oorspronkelijke schematisatie aan de kanten ook nieuwe rekenvakken maakt die bestaan uit minder dan  $n \cdot m \cdot k$  oorspronkelijke rekenvakken.

Deze wijze van samennemen is betrekkelijk eenvoudig. De methode is eigenlijk alleen geschikt voor een tweetal problemen.

Allereerst de grote zee gebieden zoals de Noord-West Europese Shelf. De grofheid aan de randen wordt daar minder gevoeld. Voor zulke modellen blijkt overigens toch al gauw de behoefte op te komen om voor de vaderlandse kust dan toch in ieder geval niet samen te nemen om resolutie te behouden.

Een tweede categorie problemen is die waar het oorspronkelijk model zo fijn was, dat met regelmatig samennemen er toch een rooster kan ontstaan dat de randen nog voldoende precies volgt. Voor gedeelten van het Kuststrookmodel zou dat kunnen gelden, voor andere delen echter ook weer niet.

Deze wijze van samennemen vraagt eigenlijk alleen een start-cel (waarvan de ligging belangrijk kan zijn) en de getallen n, m en k. Deze methode is door EDS geïmplementeerd in een batch programma zonder User Interface.

*b) onregelmatig samennemen van gehele aantallen rekenvakken*

De behoefte aan lokale verfijning kan aanleiding geven tot onregelmatig samennemen van bestaande hydrodynamische rekenvakken. In het buitengebied enkele grote cellen, in het tussengebied al wat meer detail en in het gebied van interesse hetzij de oorspronkelijke resolutie hetzij een zeer toegesneden manier van samennemen (de rekenvakken die een bepaalde geul vormen samen, die welke een platen systeem vormen samengenomen etc.). Deze laatste wijze wordt frequent gebruikt, bijvoorbeeld door RIZA-Dordrecht voor het benedenrivieren gebied, door RIKZ voor de KSENOS modellen set en door WL bijv. recentelijk in Hang-Zhou, de baai van Gdansk en het meer van Maracaibo, Venezuela. Deze wijze van samennemen vraagt een precieze beschrijving van welke hydrodynamische rekenvakken samen een waterkwaliteits segment gaan vormen. Dit is nauwelijks snel te doen zonder een grafische user-interface. WL heeft hiervoor DIDO ontwikkeld, dat inmiddels ook onder MS-Windows en op UNIX systemen is geïmplementeerd.

*c) volledig vrij bepalen van de waterkwaliteitsschematisatie*

Men kan zich indenken dat de behoefte bestaat om de waterkwaliteitsrekensegmenten in te tekenen op de bestaande hydrodynamische schematisatie. Daar waar een hydrodynamische cel doorsneden wordt, wordt een deel aan het ene waterkwaliteits segment toegerekend en het overblijvende deel aan het andere. Op deze manier zou zelfs het hydrodynamische grid nog lokaal verfijnd kunnen worden.

Het is conceptueel en technisch zeker mogelijk om zo'n wijze van samennemen te realiseren. De uitwerking van een definitie studie en de programmeringsinspanning is echter nog niet gepleegd voor 2 en 3D toepassingen. De kosten moeten ook hier tegen de baten afgezet worden. Alleen voor het (vertakt) 1-dimensionale geval zijn de conceptuele problemen veel minder groot en kan de programmeringsinspanning ook navenant beperkter zijn. Daarom is SOBEK wel met deze mogelijkheid uitgerust, in navolging van de eerdere JOINSEG functionaliteit bij WL.

Voor alle drie methoden geldt dat een volledig massa-behoudende realisatie is te ontwikkelen. Dit massabehoud is vereist voor waterkwaliteits berekeningen en vormt de kern van de complexiteit van methode c.

In deze voorstudie wordt alleen methode b nader uitgewerkt. Deze methode heeft het voordeel van conceptuele en programmatische eenvoud maar het mogelijke nadeel van 'trapjeslijnen' op de scheidsvlakken van nieuwe waterkwaliteits segmenten. Het massabehoud is eenvoudig te garanderen door gebruik te maken van de eigenschap dat als de hydrodynamische gegevens massabehoudend zijn per hydrodynamische rekencel, de gesommeerde termen dat ook zijn voor een aantal samengenomen cellen.

## 4.2 Integratie van samenneming in het koppelingsprogramma

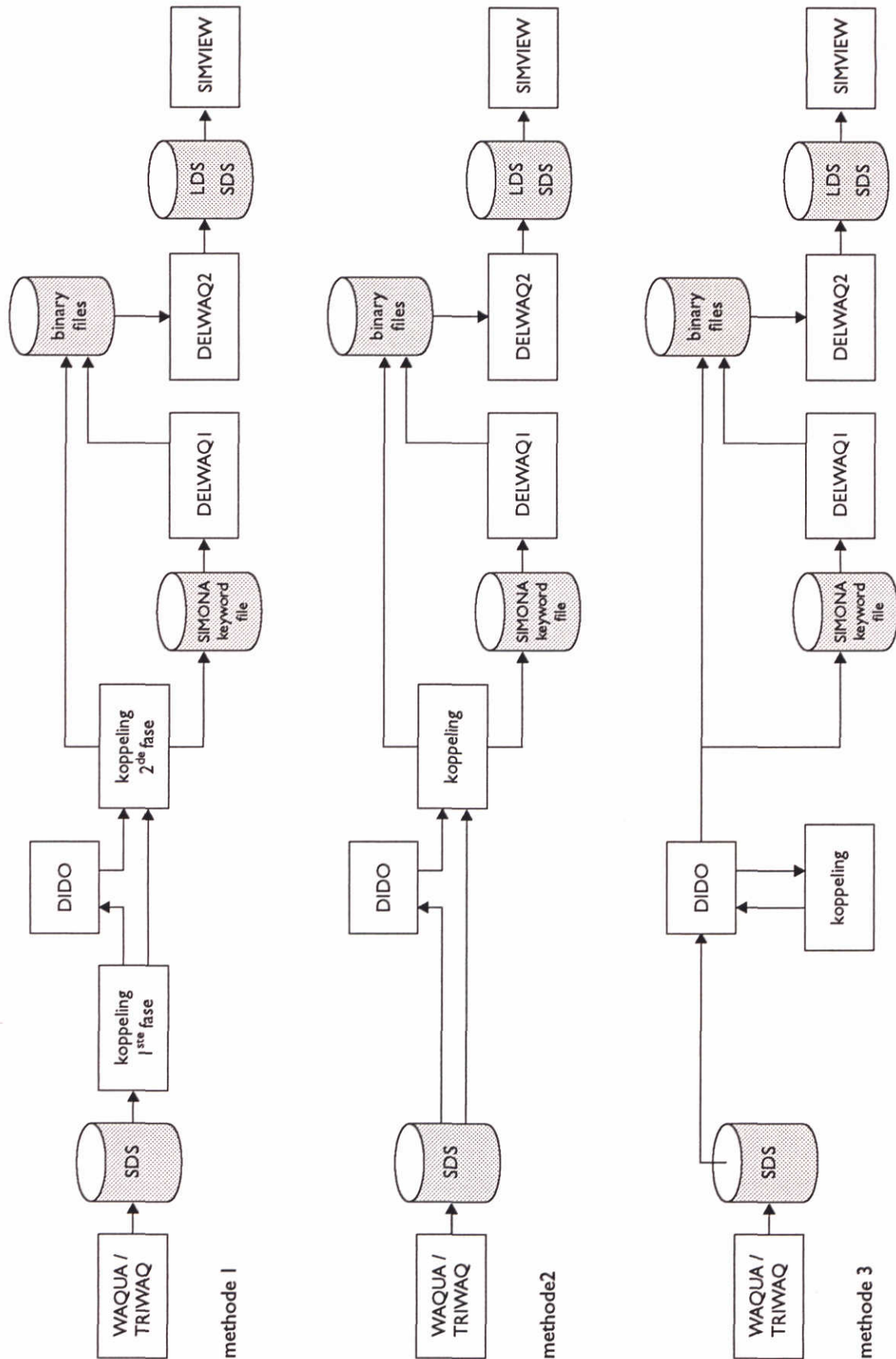
Er bestaat reeds ervaring met het samennemen volgens methode b uit de vorige paragraaf in het oude koppelingsprogramma tussen WAQUA en DELWAQ. Daarom is de uitwerking hier eenvoudig te geven. Het is van belang te constateren dat we ervoor gekozen hebben het samennemen IN het koppelingsprogramma te laten plaats hebben, en niet achteraf, op files die ontstaan uit 1-op-1 conversie van de hydrodynamica. Deze keuze is ingegeven door a) de besparing aan file ruimte die dit oplevert (men moet aan honderden megabytes denken) en b) het openhouden van de mogelijkheid het hele samennemingsproces ooit het SIMONA systeem in te schuiven, zodat de hydrodynamische run zelf al files met samengenomen resultaten produceert.

De alternatieven 1-3 in Figuur 4.1 geven een toenemende mate van integratie van het koppelprogramma van 3 afzonderlijke programma's naar 1 geïntegreerd systeem.

- Methode 1: In deze opzet worden de twee te ontwikkelen koppelingsmodulen als aparte programma's aangeroepen. In deze opzet worden de twee programma's als batch programma opgestart. Hierdoor heeft het interactieve programma DIDO geen controle mogelijkheid.
- Methode 2: In deze opzet wordt de eerste fase van de koppeling geïntegreerd in DIDO. DIDO kan in deze opzet de eerste fase van de koppeling opstarten en direct gebruiken voor toepassing.
- Methode 3: In deze opzet worden beide koppelingsprocessen vanuit DIDO gestuurd. In dit geval heeft DIDO de volledige controle over de koppeling. Dit heeft ondermeer als voordeel de mogelijkheid van een verbeterde foutafhandeling bij optreden van problemen in het koppelingsprogramma.

Een volledig geïntegreerd systeem heeft als voordeel dat de gebruikersvriendelijkheid van het systeem toeneemt. Alternatief 3 heeft derhalve de voorkeur.

De uitwerking van alternatief 3 dient verder vorm gegeven te worden in een functioneel ontwerp, voordat de realisatie plaats kan vinden. Voor de feitelijke samenneming kan gebruik gemaakt worden van delen van WAQMMF.



Figuur 4.1 Verschillende gradaties van integratie van DIDO en het koppelingsprogramma

### 4.3 Benodigde invoer voor het interactieve programma DIDO

Het interactieve samennemingsprogramma moet het actieve grid op het scherm kunnen produceren. Dit actieve grid bestaat uit die hydrodynamische rekenvakken (begrensd door 4 bodemliggingspunten in de WAQUA/TRIWAQ filosofie), die actief zouden kunnen worden.

Het actieve grid wordt getekend door lijnen tussen de bodemliggingspunten. Het waterstandspunt is het midden.

WAQUA/TRIWAQ, rekent niet de complete NMAX,MMAX,KMAX matrix door, maar kent ook actieve rekenpunten en een rooster bestaande uit een LGRID tabel, al of niet afgeleid uit een IROGEO tabel. De LGRID tabel wordt gebruikt om de oplossingsarrays, gedefinieerd op de matrix van het WAQUA/TRIWAQ rooster (grootte MMAX bij NMAX) af te beelden op een lineaire array (met daarin alleen de actieve rekenpunten  $+ 1 = MNMAXK$ ). (Voor het WL-model TRISULA, dat met een volle matrix rekent is MNMAXK gelijk aan NMAX\*MMAX\*KMAX.)

De LGRID tabel is in feite een lineaire pointer. Deze pointer is vaak groter dan het modelgebied, omdat voor een rekenvak 4 bodemliggingspunten nodig zijn. Als men de LGRID pointer laat wijzen naar het bodempunt 'rechts-boven', ontstaat er voor alle dichte randen aan de linker- en aan de onderzijde een extra rij LGRID waarden om naar een benodigd bodemliggingspunt te wijzen zonder dat het waterstandspunt wat er bij hoort ooit in de berekening wordt betrokken. Deze LGRID tabel wordt hier de 'totale LGRID tabel' genoemd.

Een verdere afbakening van het rekengrid kan bepaald worden door het gebruiken van de zogenaamde IROGEO-tabel. In deze tabel staan de door het rekenhart gebruikte rekenpunten. Deze beperking werkt echter ten dele, omdat hier geen rekening wordt gehouden met punten, waarvan de bodemligging zodanig is dat deze punten nooit actief zullen worden.

Naast de lineaire array van lokaties van bodemliggingspunten en de LGRID verwijzingstabel naar dit array, is er dus ook een tabel nodig die aangeeft welke zeta punten aan de berekening deel zouden kunnen nemen. Dit wordt ook wel de 'actieve LGRID tabel' genoemd.

Veel voorkomend gebruik is nu om te stellen: de actieve LGRID tabel is de LGRID tabel minus een rij vakjes ter linker en ter onderzijde vanwege het boven aangehaalde effect. Verder heeft men dan een schematisatie gemaakt die bijna als een volle matrix over een estuarien gebied heen ligt en men laat door de bodemligging bepalen welk deel droog blijft en welk deel nat wordt. Deze procedure geeft voor DIDO een 'actief rekengebied' waar het estuarium niet meer in te herkennen valt en interactief samennemen ook niet zinvol lijkt.

In de praktijk wordt eerst een 1-op-1 koppeling uitgevoerd. Uit de analyse van de hydrodynamische gegevens is dan afgeleid welke waterstanden ooit binnen het getij veranderden en zo is een 'actieve LGRID tabel' gemaakt. Het mag duidelijk zijn dat deze tabel per run verschilt ! Voor KSENOS zijn de tabellen horende bij alle runs ge-OR-ed om de tabel te krijgen waarmee gewerkt wordt. Om deze problemen te voorkomen dient een extra LGRID tabel toegeleverd te worden die eenduidig aangeeft welke cellen het toegestaan wordt om aan de berekening mee te doen. Dit heeft ook nog bijkomende voordelen omdat zo voorkomen wordt dat er 'droogvallende platen' optreden aan een steile kliffenkust. Verder wordt voorkomen dat zich achter de kustlijn nog paren rekenvakken bevinden waar water in staat (die bij opgelegde wind ook in beweging komt) terwijl het paar niet verbonden is met het rekengebied (daar was het immers door fijn-tunen van de kustlijn met droge schotjes van afgescheiden).



De actieve LGRID tabel dient nog aan een vereiste te voldoen. Op de plaats waar het waterstandspunt hetzij over een open u- of v-rand ligt, dan wel waar het waterstandspunt zelf open randvoorwaarde is, dient in de actieve LGRID tabel een negatieve waarde te verschijnen, omdat DIDO anders niet weet welke randen open en welke gesloten zijn. In principe mag de actieve LGRID tabel bestaan uit -1 op de lokaties van open randen, 1 op de lokaties van actieve waterstandpunten en 0 op lokaties van inactieve waterstandpunten. In principe mag de actieve LGRID tabel ook bestaan uit MNMAXK entries in plaats van uit NMAX\*MMAX entries en verwijzen naar de functie van cellen uit de totale LGRID tabel in plaats van uit het grid zelf.

Bij feitelijke aanmaak van het koppelingsprogramma zal nog in overleg met de WAQUA/TRIWAQ-beheerder worden bezien welke mogelijkheden er zijn voor de aanmaak van een "actieve LGRID tabel". Het is niet uitgesloten dat deze tabel uit de IROGEO tabel wordt afgeleid, gebruik makend van informatie met betrekking tot de zogenaamde open randen. Het is dan de verantwoordelijkheid van de modelleerder om het rekengebied goed te laten aansluiten bij het fysische gebied.

Het spreekt vanzelf dat ook de waarden van NMAX, MMAX, KMAX en MNMAXK nodig zijn voor een correct functioneren.

#### 4.4 Uitvoer uit het programma DIDO

Na toepassing van het DIDO programma zullen door DIDO de volgende grootheden gegenereerd zijn:

- 1 - NOSEG: Het aantal actieve DELWAQ rekenvakken.
- 2 - NOBND: Het aantal open randvoorwaarden in de DELWAQ schematisatie
- 3 - NOQ: Het aantal raakvlakken tussen DELWAQ rekenvakken, waarover debiet kan plaatshebben
- 4 - een pointertabel met MNMAXK integer waarden. Deze waarden liggen allen tussen -NOBND en +NOSEG en zijn:
  - 0 als de betreffende LGRID cel niet deelneemt aan de DELWAQ schematisatie
  - x als de betreffende LGRID cel onderdeel is van open randvoorwaarde x in DELWAQ
  - y als de betreffende LGRID cel onderdeel uitmaakt van het (evt. grotere) DELWAQ rekensegment y. Dit is de zogenaamde segmentspointer.
- 5 - een pointertabel met 2\*MNMAXK integer waarden (of een (MNMAXK,2) matrix zo men wil) met eerst in de u en dan in de v richting waarden tussen -NOQ en +NOQ met als betekenis:
  - positieve waarde: Het betreffende debiet hoort bij het aangegeven raakvlak
  - 0 Het betreffende debiet speelt geen rol voor DELWAQ
  - negatieve waarde: Het betreffende debiet hoort bij het aangegeven raakvlak, maar in omgekeerde richting.

Dit is de zogenaamde uitwisselingspointer.

- 6 - een binaire file met de voor DELWAQ benodigde 'van, naar, van-1, naar+1' array
- 7 - een binaire file met de voor DELWAQ benodigde 'van en naar lengtes'

## 4.5 Wat de koppelingsroutines gaan doen

- a) Een VOLUMES file voor DELWAQ aanmaken, bestaande uit de DELWAQ segment volumes, verkregen door de WAQUA/TRIWAQ volumes gepointerd met de segmentspointer op te tellen wanneer deze pointer positief is. De records bestaan uit NOSEG volumina.
- b) Een AREAS file voor DELWAQ aanmaken, bestaande uit de uitwisselingsoppervlakken uit WAQUA/TRIWAQ gepointerd met de uitwisselingspointer opgeteld (ook bij negatieve pointer). De records bestaan uit NOQ areas. Droge schotjes zullen hierbij niet worden betrokken.
- c) Een FLOWS file voor DELWAQ aanmaken, bestaande uit debieten afgeleid uit WAQUA/TRIWAQ, gepointerd met de uitwisselingspointer opgeteld. Bij negatieve pointer dient het teken van het debiet omgedraaid te worden voordat optelling plaats heeft. De records bestaan uit NOQ debieten.
- d) Indien gewenst: Een file met constituenten (bijv. zoutgehalten) aan te maken zoals uitgerekend met WAQUA/TRIWAQ. Hiertoe dienen de concentraties, vermenigvuldigd met het volume (dus de massa) gepointerd te worden opgeteld met de segmentspointer, zowel als deze positief als negatief is, alleen bij negatieve pointer op andere lokaties. De uitkomst is dus een NOSEG+NOBND lang array. Voor de negatieve lokaties moet maar als volume 1.0 genomen worden en deze volumina moeten ook ergens opgeteld worden. Na de optelling wordt de array gedeeld door de onder a) opgetelde volumina met voor de open randen een deling door het aantal opgetelde 1.0 waarden voor die rand. Dit levert voor de open randen een gewoon gemiddelde en voor de concentraties in het gebied een volume gewogen gemiddelde. Dit laatste is nodig voor massabehoud.
- e) Indien gewenst: een file met door WAQUA/TRIWAQ berekende dispersiecoëfficiënten over de raakvlakken, gewogen gemiddeld opgeteld, zoals onder d) genoemd, maar nu met de uitwisselingspointer en met de AREAS als wegingsfaktor, zowel voor positieve als negatieve pointer.
- f) Een file met horizontale oppervlakken van DELWAQ segmenten, opgeteld met de segmentspointer.
- g) Waar gewenst: een file met ruimtelijk variërende wind, dan wel Chezy waarden, opgeteld en gewogen gemiddeld met de horizontale oppervlakken als bedoeld onder f).

- h) Een SIMONA keyword gestuurde invoerfile voor DELWAQ, waarbij:
- het aantal rekenvakken naar NOSEG is gebracht, en het aantal uitwisselingen naar NOA,
  - de waarnemingspunten (history points) met de segmentspointer zijn vertaald,
  - naar de correcte (samengenomen) resultaten files verwezen wordt,
  - de lozingspunten voorzover bekend in WAQUA/TRIWAQ met de segmentspointer in het juiste segment zijn gebracht.
  - de juiste modelidentificatie overgedragen wordt,
  - de modeltimers overgedragen worden.
- i) Op zich zou de gebruiker gediend kunnen zijn bij het aangeven van het uitwisselingsnummer in DELWAQ waar de evt. aanwezige barriers en/of overlaten toe behoren. Dat kan als printout in de report file. De modelleerder moet daar toch naar eigen inzicht handelen.

## 5 Koppeling DELWAQ - SIMVIEW

Er zijn twee mogelijkheden om de koppeling tussen DELWAQ en SIMVIEW te realiseren:

- 1) Presentatie van de DELWAQ rekenresultaten op het oorspronkelijke WAQUA grid
  - 2) Presentatie van de DELWAQ rekenresultaten op het DELWAQ grid
- ad 1) Voor de presentatie van de DELWAQ uitvoer met behulp van SIMVIEW worden de DELWAQ rekenresultaten afgebeeld op het oorspronkelijke WAQUA grid. Aangezien in SIMVIEW gewerkt kan worden met het WAQUA grid is het derhalve relatief eenvoudig om de koppeling op deze manier te realiseren.

Een belangrijke beperking van deze methode is dan echter dat er voor de presentatie met SIMVIEW een WAQUA model beschikbaar moet zijn, zodat de presentatie van DELWAQ resultaten van een berekening, waarvan geen WAQUA model beschikbaar is, niet mogelijk is.

- ad 2) Bij deze optie is het wel mogelijk om DELWAQ resultaten te presenteren met behulp van SIMVIEW zonder dat er een WAQUA model beschikbaar moet zijn.

SIMVIEW moet in dit geval uitgebreid worden voor het kunnen interpreteren van een niet gestructureerd grid.

Binnen DELWAQ is geen geografische informatie beschikbaar met betrekking tot de ligging en de vorm van de cellen. Deze informatie moet door middel van een externe file worden aangeleverd.

Er zijn twee mogelijkheden om de resultaten te presenteren, namelijk door middel van isolijnen of door middel van vlakvulling.

Bij de presentatie van isolijnen wordt voorgesteld om de presentatie door middel van een verzameling van punten (coördinaten) en resultaten op te slaan. Men moet zich in dit geval wel realiseren dat in DELWAQ de resultaten gedefinieerd zijn in de middens van de cellen, waardoor bij deze presentatiewijze op een deel van het rekegebied geen resultaten worden gepresenteerd. Uitbreiding van de puntenwolk naar de randen van het modelgebied kan hierbij een oplossing brengen.

Bij de presentatie van de DELWAQ resultaten door middel van vlakvulling worden polygonen gedefinieerd, zijnde de DELWAQ-rekencellen, elk van deze polygonen wordt vervolgens gekleurd.

Binnen SIMONA wordt gewerkt met een lokale datastructuur (LDS). Modelgegevens die tussen de afzonderlijke systemen moeten worden uitgewisseld, moeten in de LDS worden opgenomen. De LDS kan opgeslagen worden op de SDS-file.

Voor DELWAQ moet een LDS worden gedefinieerd. In deze LDS komen de voor SIMVIEW benodigde gegevens te staan.

Ten behoeve van het schrijven van de LDS naar de SDS-file worden de volgende vier subroutines gedefinieerd, met de volgende functies:

- a) Initialisatie van de SDS-file.  
Hier wordt de DELWAQ SDS-file geïnitieerd en de benodigde informatie, die niet binnen DELWAQ beschikbaar is, van de WAQUA SDS-file ingelezen en weggeschreven naar de DELWAQ SDS-file.  
In deze routine wordt tevens de initialisatie van de SIMONA omgeving meegenomen.
- b) Wegschrijven van de 'map data' op het WAQUA grid naar de SDS-file.
- c) Wegschrijven van de 'history data' naar de SDS-file.
- d) Sluiten van de SDS-file.

Deze subroutines worden zodanig opgezet, dat deze subroutines vanuit DELWAQ kunnen worden aangeroepen.

Ten behoeve van SIMVIEW moet voor de DELWAQ-LDS een metafile worden gemaakt. De metafile bevat een beschrijving van de LDS ten behoeve van SIMVIEW.

#### a) Initialisatie

De initialisatie routine verzorgt:

- initialisatie van de simona common blocks (de namen van deze common blocks starten met CSI);
- het openen van de delwaq sds-file en voor het wegschrijven van de vaste gegevens. Een aantal van deze gegevens wordt door deze routine uit de waqua sds-file gehaald.

Voor de initialisatie van de sds-file zijn de volgende invoergegevens nodig:

- naam van de WAQUA SDS-file;
- experimentnaam van de WAQUA berekening;
- naam van de DELWAQ SDS-file;
- experimentnaam van de DELWAQ berekening;
- tijdframe voor map data (time first, time interval, time last);
- tijdframe voor history data (time first, time interval, time last);
- aantal stations voor history data;
- het aantal gebruikte STOFFEN.

Deze subroutine geeft vervolgens een referentienummer van de SDS-file terug. Dit nummer wordt vervolgens gebruikt door de andere drie subroutines

**b) Wegschrijven van de 'map data' op het WAQUA grid naar de SDS-file**

Deze subroutine wordt door delwaq tijdens de simulatie aangeroepen om de zogenaamde map data naar de sds-file te schrijven.

Invoergegevens voor deze routine zijn:

- ruimtelijke gegevens op het waqua rooster (volgens LGRID weggeschreven);
- het tijdstip, waarvoor deze gegevens geldig zijn;
- experimentnaam;
- referentienummer van de sds-file.

**c) Wegschrijven van de 'history data' naar de SDS-file**

Deze subroutine wordt door delwaq tijdens de simulatie aangeroepen om de zogenaamde history data naar de sds-file te schrijven.

Invoergegevens voor deze routine zijn:

- gegevens op het WAQUA rooster (volgens LGRID weggeschreven);
- het tijdstip, waarvoor deze gegevens geldig zijn;
- experimentnaam;
- referentienummer van de sds-file.

**d) Sluiten van de SDS-file**

In deze routine wordt de sds-file gesloten.

De benodigde invoer voor deze routine is:

- experimentnaam;
- referentienummer van de sds-file.

## 6 Beheer, onderhoud en normen

In het kader van het beheer en onderhoud van DELWAQ en de koppelprogrammatuur moeten de volgende aspecten worden geregeld:

- 1) De helpdeskfunctie  
Het aanspreekpunt, waar medewerkers van Rijkswaterstaat contact mee kunnen opnemen, indien zij problemen of vragen hebben over hetzij DELWAQ hetzij de koppelprogrammatuur.
- 2) Het onderhoud  
Het aanbrenge van de verbeteringen in de programmatuur.
- 3) Het beheer en exports  
Hieronder valt het versiebeheer en de beschikbaarstelling op de verschillende machines bij Rijkswaterstaat.

### 1) De helpdeskfunctie

Het aanspreekpunt voor het aanmelden van vragen en problemen voor Rijkswaterstaat kan EDS zijn. Dit kan in het kader van het SIMONA beheer en onderhoudscontract geregeld worden.

Op het moment dat een vraag/probleem over de koppeling SIMONA-DELWAQ gaat, wordt bekeken of het onderdelen van SIMONA betreft, die door EDS kunnen worden afgehandeld of dat WL ingeschakeld moet worden voor de afhandeling. In dat geval zal EDS contact opnemen met de DELWAQ-beheerder bij WL. De contactpersonen van WL en EDS spreken af hoe en wie de desbetreffende vraag/probleem verder afhandelt.

Ook als voor een vraag/probleem het niet noodzakelijk wordt geacht om contact op te nemen met de DELWAQ-specialist bij WL, terwijl het wel de koppeling SIMONA-DELWAQ betreft, draagt EDS er zorg voor dat een afschrift van de vraag/probleem bij WL komt. Dit maakt het mogelijk om ook ongevraagd, op grond van ervaring, te reageren.

### 2) Het onderhoud

Voor het aanbrenge van de verbeteringen stellen wij voor om in principe de partij, die de programmatuur heeft gemaakt ook de verbeteringen aan te laten brengen.

Dit betekent dat WL het onderhoud van de onderdelen DIDO en DELWAQ op zich zal nemen. Voorgesteld wordt om dit deel van het onderhoud in een apart contract tussen Rijkswaterstaat en WL onder te brengen.

### 3) Het beheer en exports

WL is binnenkort in staat om versies van DELWAQ1 en DELWAQ2 voor alle binnen RWS gangbare systemen aan te maken. Voorgesteld wordt om deze via de SIMONA Helpdesk binnen de RWS organisatie te verspreiden. EDS en WL regelen onderling op welke wijze het van de door hen beiden beheerde modules tot een leverbare executable komt.

## Normen

De deelsystemen die in het kader van SIMONA beheer en onderhoud worden ondergebracht zullen aan de SIMONA normen voldoen. De programma's DELWAQ1, DELWAQ2 en DIDO zijn programma's die niet aan de SIMONA normen voldoen. Voor de wijzigingen van deze programma's die in het kader van het mogelijke vervolgproject worden aangebracht, zal evenmin aan de SIMONA normen worden voldaan.

## Nader te maken afspraken

- Met betrekking tot het SIMONA B+O contract moeten afspraken gemaakt worden tussen Rijkswaterstaat en EDS over de toevoeging van de taken voor EDS binnen het SIMONA B+O contract.
- Rijkswaterstaat moet met WL een B+O contract voor DELWAQ afsluiten.
- Binnen beide beheer- en onderhoudscontracten moet ruimte gereserveerd worden voor overleg tussen EDS en WL. Voor de export naar de SUN en HP moet bij WL tijd in het contract worden opgenomen voor ondersteuning van EDS bij problemen met betrekking tot de exports.



## 7 Werkplan en begroting

Op basis van de analyse uit de vorige hoofdstukken zijn de navolgende taken te onderscheiden:

### 7.1 Export van waterbewegingsresultaten

Het betreft hier de uitbreiding van de al bestaande koppelingsprogrammatuur met de in dit rapport genoemde grootheden. Verder, waar nodig, de omzetting van de koppelingsprogrammatuur tot een subroutine bibliotheek. Deze werkzaamheden zijn voorzien voor EDS. Totaal 5 manweken (mw).

### 7.2 Generatie van een SIMONA keyword structuur invoerfile voor DELWAQ

Het betreft hier:

- a - de aanmaak van de referentie tabel
- b - de aanmaak van een template van de DELWAQ invoerfile
- c - de aanmaak van de subroutines om de file te schrijven
- d - eventuele aanpassingen aan de SIPREP programmatuur, of de omringende bibliotheek.

Deze werkzaamheden zijn voorzien voor EDS. Eventueel kunnen a) en/of b) verricht worden door belanghebbende waterstaatsdiensten. Totaal 4 tot 5 mw.

Bij volledige overgang van DELWAQ naar de SIMONA-keyword gestructureerde invoer file is het noodzakelijk om een conversieprogramma te ontwikkelen, die bestaande DELWAQ-modellen omzet naar de nieuwe keyword gestructureerde invoer. Kosten p.m.

### 7.3 Schrijven van een DELWAQ invoer processor op basis van de keyword structuur

Twee opties liggen hier voor:

- a - Zo eenvoudig mogelijk  
Het betreft hier het analyseren van de invoerfile, zodanig dat met zo weinig mogelijk keywords, zo dicht mogelijk tegen de huidige DELWAQ invoer file aan een niet erg flexibele oplossing gemaakt wordt. De analyse wordt op 1 mensmaand geschat, de implementatie op 1 mensmaand en de documentatie op 2 mensweken. Totaal 10 mw.
- b - Zo generiek mogelijk in de SIMONA gedachte  
Het betreft hier de implementatie van het voorliggende voorstel. De verdere analyse neemt dan 2 mw, de implementatie 3 mm en de documentatie 1 mm. Totaal 18 mw.

De extra kosten voor het laten voldoen van de aanpassingen aan de SIMONA-normen wordt geschat op 5 mw.

Deze werkzaamheden zijn voorzien voor WL.

Het is mogelijk om een deel van de problematiek rondom de afhandeling van tijdreeksen door standaard SIMONA routines te laten afhandelen (zie blz 3-16). Deze routines zullen dan echter moeten uitgebreid. De kosten zijn afhankelijk van de gewenste functionaliteit en de gekozen aanpak voor de afhandeling van deze reeksen. Kosten p.m.

## 7.4 Aanpassen van DIDO

Hier liggen 3 opties voor:

- a - Methode 1 van figuur 2, De koppeling maakt eerst DIDO files en leest dan het DIDO resultaat in een tweede slag. De kosten van deze aanpassing aan DIDO bedragen 1 mw plus 1 mw voor documentatie. Daarbij komen de kosten om het koppelingsprogramma zo'n 2 steps mode te geven, zijnde 1 mw EDS. Totaal 3 mw.
- b - Methode 2 van figuur 2, DIDO leest direct SIMONA files en levert files voor het koppelingsprogramma. De kosten van deze aanpassingen bedragen 1 mw van EDS om de koppeling Fortran-C goed te regelen en de juiste eenheden uit de SDS file te plukken. Aanpassing van DIDO 1 mw plus 1 mw voor de documentatie en 1 mw testen. Totaal 4 mw.
- c - Methode 3 van figuur 2, DIDO roept de koppelingsroutines direct aan. De inspanningen zijn hier die van optie b plus 1 mw EDS extra voor de FORTRAN-C interface van de subroutine bibliotheek en 2mw WL extra voor testen en communicatie. Dit geeft totaal 7 mw.

Bij alle 3 opties komt 1 mw implementatie van DIDO onder SUN-SOLARIS.

## 7.5 Naverwerking

Het betreft hier de aansluiting op SIMVIEW, middels een aantal subroutines.

Voor de koppeling zijn in deze rapportage twee verschillende opties uitgewerkt:

- a - Presentatie van de DELWAQ rekenresultaten op het oorspronkelijke WAQUA rooster  
Voor optie a moeten de volgende werkzaamheden worden uitgevoerd:
  - definitie van een LDS voor DELWAQ
  - aanmaken van een SIMVIEW metafile.
  - aanmaken van een viertal schrijfroutines die in DELWAQ moeten worden aangeroepen voor het aanmaken van een SDS-file.
  - inbouw van bovengenoemde routines in DELWAQ.EDS werkt punten 1 t.e.m. 3 uit, WL punt 4. Totaal 6 mw. EDS en 1 mw WL.

- b - Presentatie van de DELWAQ rekenresultaten op het DELWAQ rooster  
Het realiseren van deze oplossing vergt een aanpassing van SIMVIEW. De kosten voor het maken van deze aanpassing wordt geschat op 3 tot 6 mw. Het totaal voor deze optie komt dan op 9 tot 12 mw EDS en 1 mw WL.  
DELWAQ werkt intern niet met coördinaten. Gegevens over de ligging van de segmenten is opgeslagen in een interne file. Voor de presentatie, zullen deze gegevens beschikbaar gemaakt moeten worden. Kosten p.m.

## 7.6 Uittesten

Het betreft hier het in detail uittesten van het geheel, door voor 1 of 2 proef gebieden de beoogde functionaliteit te verrichten en het correct functioneren uit te testen. De hiervoor benodigde tijdsinspanning zal aan WL zijde ca 3x hoger zijn dan aan EDS zijde. Dat komt omdat bij niet-functioneren de (gedetailleerde) bewijslast van de reden altijd bij WL ligt. Alle betrokkenen hebben immers naar beste weten hun produkt gemaakt en het eindresultaat klopt niet. De zoektocht begint dan bij het eind. Een WL inzet van 3 tot 5 mw lijkt een reële schatting. Voor EDS 2 mw.

## 7.7 Beheer en onderhoud

De kosten hiervan zijn mede afhankelijk van het gebruik van het instrument. De geschetste procedure voorziet in een helpdesk functie die uit zijn aard een basisbedrag aan kosten met zich brengt. Door voor het hier geschetste instrument van dezelfde helpdesk gebruik te maken, wordt efficiency bereikt. Een schatting van kosten bestaande uit 10% van de huidige projectkosten per jaar, lijkt een verantwoorde initiële schatting. Hierbij wordt ervan uitgegaan dat er genoeg gebruikers van het instrument zijn om gemiddeld steeds tot 1 à 2 gelijktijdige gebruikers te komen.

Er wordt aanbevolen om hetzij, inhoudelijke wensen die tijdens gebruik naar voren komen, ook in gelimiteerde mate onder beheer en onderhoud te honoreren, hetzij een apart fondsje voor inhoudelijke wensen in het leven te roepen.

## 7.8 Samenvatting begroting met opties

In het volgende overzicht zijn de schattingen van de inspanningen in mensweken samengevat. Punten a en b zijn afzonderlijk te kiezen. Wanneer e gekozen wordt, dient uitvoering plaats te vinden samen a en b. Kiezen van f op WAQUA-rooster verlangt ook a en b en eventueel e, maar uitvoering hoeft niet gelijktijdig te geschieden.

		EDS	WL
a)	Export waterbewegingsresultaten schrijven ASCII invoerfile (7.1, 7.2 + delen 7.6)	10	2
b)	Aanmaak DELWAQ invoerprocessor (7.3 + delen 7.6)	<i>beperkt:</i> <i>volledig:</i>	11 19
c)+d)	Overgang algemene DELWAQ invoer op SIMONA-structuur, aanpassingen SIMONA	p.m.	p.m.
e)	Aanpassingen aan DIDO (7.4)	<i>methode 1:</i> <i>methode 2:</i> <i>methode 3:</i>	1 1 2 2 3 5
f)	Aansluiting op SIMVIEW	<i>WAQUA rooster</i> <i>willekeurig rooster</i>	6 9 à 12 2 2

Het uittesten is bij verschillende onderdelen ondergebracht. De schattingen als hier opgegeven, dragen nog niet het karakter van een formele offerte.

## **Bijlage A**

## MEMO WST 95.016

Dordrecht, 21 maart 1995

betreft : Voorstel beschrijving DELWAQ invoerfile m.b.v. de SIMONA keyword structuur  
 van : Marjolein Sileon  
 aan : betrokkenen

## 1. Inleiding

In deze memo wordt een voorstel beschreven voor een nieuwe structuur van de DELWAQ 4.0 invoerfile waarbij gebruik gemaakt wordt van de SIMONA keyword structuur.

In de beschrijving wordt aangegeven welke gegevens aangeleverd kunnen worden door WAQUA(-in-Simona), en welke keywords en structuren nieuw zijn voor SIMONA. Tot slot wordt een vergelijking gemaakt tussen de in deze memo beschreven gegevens die aangeleverd kunnen worden door WAQUA(-in-Simona) en de interfacefile zoals beschreven in 'User's guide WAQMMF'.

Met betrekking tot deze invoerbeschrijving kunnen de volgende algemene opmerkingen gemaakt worden:

- De algemene regels met betrekking tot de Simona Keyword structuur gelden.
- De gegevens die aangeleverd worden uit WAQUA(-in-Simona) worden aangegeven met het woord 'waqua' in de kantlijn.
- De voorgestelde nieuwe structuren worden aangegeven met het woord 'new' in de kantlijn.
- In DELWAQ kan bij de invoer van data gebruik worden gemaakt van schaalfactoren. In dit voorstel is het gebruik van schaalfactoren niet opgenomen omdat dit in SIMONA momenteel niet mogelijk is. Bekeken moet worden of het gebruik van schaalfactoren in de DELWAQ invoerfile noodzakelijk blijft.
- In DELWAQ kan gebruik worden gemaakt van het herhalingsteken (\*) voor invoer van een aantal dezelfde getallen. Het is niet duidelijk of deze mogelijkheid ook in SIMONA beschikbaar is.
- In DELWAQ worden een aantal gegevens ingelezen volgens structuren die (nog) niet in SIMONA beschikbaar zijn. Aangezien deze structuren meerdere malen in de invoer gebruikt kunnen worden, worden ze hier alvast beschreven. Vanuit de invoerbeschrijving zal verwezen worden naar deze structuren onder vermelding van het nummer:

## 1. Tijdschalen en eenheid van tijd

Delwaq kent maximaal 3 verschillende tijdschalen:

- System timer: voor transport processen
- Auxiliary timer: voor functies en segmentfuncties
- Proces timer: voor processen in de procesbibliotheek (versie 4.0)

De procestimer is altijd dag<sup>-1</sup>, system en auxiliary timer zijn door de gebruiker te kiezen (voorwaarde is wel dat auxiliary timer >= system timer). Invoer van tijden vindt plaats in de gekozen eenheid. Indien de eenheid 'seconden' is kan ook gekozen worden voor het 'ddhhmmss' format.

## riza

Voorstel voor SIMONA structuur:

De gebruiker kiest tijdschalen voor system en auxiliary timer met behulp van:

new D SYSTEMTIMER=[text]  
new D AUXTIMER=[text]

Mogelijke teksten zijn: 'seconds', 'minutes', 'hours', 'days', etc...

Default: 'seconds'

De invoer van tijden vindt plaats in de gekozen eenheid of in het format (dd hh:mm), waarbij 'mm' een gebroken getal mag zijn. Het invoerformat (dd hh:mm) wordt gekozen door bij SYSTEMTIMER en/of AUXTIMER het volgende keyword te vermelden:

new D DDHHMM

Default: geen (dd hh:mm) format.

### 2. Inlezen andere fileformaten

In Delwaq kunnen behalve de invoerfile ook andere ASCII files en binaire files ingelezen worden. In SIMONA kunnen momenteel behalve de invoerfile andere ASCII files ingelezen worden (INCLUDE FILE=) en SDS-files met eerdere berekeningen (READ\_FROM).

Voorgesteld wordt om SIMONA uit te breiden met de mogelijkheid om verschillende fileformaten in te kunnen lezen:

```
X | INCLUDE FILE=[text]
  <
X | READ_FROM
  <
X | invoer in deze file
```

Voor de SIMONA SDS-file geldt:

```
READ_FROM
  EXP_INITIAL=[text] SDS_INITIAL=[text] TIME_INITIAL=[val]
```

Voor de binaire Delwaq file geldt:

new READ\_FROM  
M FILE=[text]  
O TIME\_INITIAL=[val]

Eventueel kan afhankelijk van de file extentie onderscheid worden gemaakt tussen meerdere formaten.

### 3. Invoer van plaats en tijdsafhankelijke data

In Delwaq zijn voor de invoer van plaats en tijdsafhankelijke data een aantal mogelijkheden beschikbaar:

Optie 1:

keuze invoerformaat (zie hierboven nr. 2)

Optie 2:

```
1 variabele constant zonder default
2 variabele constant met default
3 variabele tijdsafhankelijk
```

Bij optie 2 = 1:

Invoer van n waarden (n=bijvoorbeeld aantal segmenten)

Bij optie 2 = 2:

Invoer van een defaultwaarde +  
Combinaties van itemnummers (bijvoorbeeld segmentnummer) en  
overschrijvingswaarden.

## riza

Bij optie 2 = 3:

Optie 3:

- 1 blokfunctie
- 2 lineair interpoleren
- 3 harmonische functie
- 4 Fourierfunctie

Er kunnen naast elkaar verschillende opties voor tijdsafhankelijke data gekozen worden

Binnen SIMONA wordt de volgende structuur voorgesteld voor invoer van tijds en plaats afhankelijke data:

```
new
S < item[iseq]
M   GLOBAL
O   | CONST_VALUES=[val]
O   | <
O   | VARIABLE_VALUES=<[val]>
O   LOCAL
S   | < ISEQ=[ival] VALUES=[val]>
<
O   TIME_FUNCTIONS
S   | TIMESERIES
O   |   <TS: ISEQ=[ival]
O   |   SERIES=[text]
O   |   | FRAME=[tval1] [tval2] [tval3]
O   |   | VALUES=<[val]>
O   |   | <
O   |   | <TIME_AND_VALUES=[tval] [val]>
O   |   BLOCKFUNCION
<
O   FOURIER
S   |   <F: ISEQ=[ival]
M   |   AZERO=[val]
M   |   OMEGA=<[val]>
M   |   AMPL=<[val]>
M   |   PHASE=<[val]>
>
>
```

Opmerking:

- Bovenstaande structuur is een keuze uit vele mogelijkheden. In de DELWAQ invoerfile vormen tijds- en plaatsafhankelijke data een belangrijk onderdeel van de invoer. Daarom moet de uiteindelijke structuur ook zeer zorgvuldig gekozen worden.
- tval is de tijd in eenheden van de gekozen timer of in het format (dd hh:mm), zie punt 1.
- Bij een aantal variabelen zal bovenstaand blok maar 1 keer opgegeven worden (bijvoorbeeld debieten en volumes). Bij andere variabelen moet bovenstaand blok een aantal malen worden herhaald (bijvoorbeeld bij lozingen of randvoorwaarden).
- bovenstaande structuur is een combinatie van bestaande (doch niet algemene) SIMONA structuren met geringe wijzigingen:
  - . In de Fourier structuur zoals bekend in WAQUA wordt OMEGA voor de N componenten slechts eenmalig opgegeven voor alle reeksen, terwijl AZERO, AMPL en PHASE voor iedere reeks opnieuw opgegeven moeten worden. Dit is waarschijnlijk te beperkt voor DELWAQ, vandaar de gewijzigde structuur.
  - . In de bovenstaande structuur en in WAQUA kan één ISEQ (bijvoorbeeld segmentnummer of uitwisselingsnummer) per TS of F blok worden opgegeven. Overwogen moet worden of het wenselijk is om meerdere ISEQ per blok in te voeren (huidige mogelijkheid DELWAQ).



## riza

- BLOCKFUNCTION geeft aan hoe geïnterpoleerd moet worden.  
Default = lineaire interpolatie.
- Een voorbeeld van de invoer van tijdsafhankelijke data staat in de bijlage.

2. Beschrijving DELWAQ invoerfile volgens de SIMONA keyword structuur

```
IDENTIFICATION (M)
MESH (M)
FLOW (M)
TRANSPORT (M)
DISPLAYS (O)
SDSOUTPUT (O)
PRINTOUTPUT (O)
```

2.1 IDENTIFICATION

In dit blok wordt algemene informatie over de run gegeven:

```
IDENTIFICATION
DELWAQ
EXPERIMENT= [text]
OVERWRITE
MODID= [text]
TITLE= [text]
```

new	DELWAQ	M	programma identificatie
	EXPERIMENT= [text]	M	experimentnaam, lengte maximaal 40 characters
	OVERWRITE	D	default: niet overschrijven
	MODID= [text]	O	modelidentificatie, lengte maximaal 68 characters
	TITLE= [text]	O	runidentificatie, lengte maximaal 72 characters

Opmerkingen:

- Aantal characters per regel voor de invoer- en uitvoerfile is standaard 80.
- Kommentaar character = #

2.2 MESH

In dit blok wordt informatie over de geometrie van het model gegeven:

```
MESH
    COMPARTMENTS (M)
    INTERFACES (M)
    LENGTHS (M)
    SURFACES (O)
    BOUNDARIES (O)
    DISCHARGES (O)
```

2.2.1 COMPARTMENTS

```
waqua    COMPARTMENTS
          NOCELL=[ival]

new NOCELL=[ival]      M      aantal segmenten
```

2.2.2 INTERFACES

```
waqua    INTERFACES
          MEXCH=[ival1] NEXCH=[ival2] KEXCH=[ival3]
          EXCHANGES
          < SECTION[iseq]: CELL=[ival1] CELL=[ival2] CELL=[ival3]
          CELL=[ival4]
          >

new INTERFACES          M      keyword uitwisselingen
new MEXCH=[ival1]      M      aantal uitwisselingen x-richting
new NEXCH=[ival2]      M      aantal uitwisselingen y-richting
new KEXCH=[ival3]      M      aantal uitwisselingen z-richting
new SECTION[iseq]      S      uitwisselingsnummer
new CELL=[ival1]       M      'van' segment nummer
new CELL=[ival2]       M      'naar' segment nummer
new CELL=[ival3]       M      'van-1' segment nummer
new CELL=[ival4]       M      'naar+1' segment nummer
```

2.2.3 LENGTHS

```
waqua    LENGTHS
          |
          | DELTX=[val1] DELTY=[val2] DELTZ=[val3]
          | <
          | GLOBAL
          | |
          | | CONST_VALUES=[val1] [val2]
          | | <
          | | VARIABLE_VALUES=.....
```

Zie verder algemene structuren, punt 3.  
Per uitwisseling moet een van-lengte en een naar-lengte worden opgegeven. In de tijd variërende uitwisselingen zijn eveneens mogelijk?

```
new LENGTHS          M      keyword uitwisselingslengtes
new DELTX=[val1]      O      uitwisselingslengte x-richting
new DELTY=[val2]      O      uitwisselingslengte y-richting
new DELTZ=[val3]      O      uitwisselingslengte z-richting
new CONST VALUES=   O      van-lengte, naar-lengte voor alle
  [val1] [val2]                                     uitwisselingen.
```

2.2.4 SURFACES

```

waqua      SURFACES
           GLOBAL
           |
           |< CONST_VALUES=[val]
           |
           |> VARIABLE_VALUES=.....
    
```

Zie verder algemene structuren, punt 3.  
 Per segment moet een oppervlak worden opgegeven. In de tijd variërende oppervlakken zijn eveneens mogelijk?

```

new SURFACES      O      keyword oppervlakten
new CONST_VALUES=[val]  O  oppervlakte voor alle segmenten
    
```

2.2.5 BOUNDARIES

```

           BOUNDARIES
           BOUNDARYNAMES
           < BO[iseq] NAME=[text] >
    
```

```

new BOUNDARYNAMES      M      keyword definitie randen
new BO [iseq]          S      randvoorwaarde nummer (absolute waarde van
                             randnummer uit uitwisselingen tabel)
new NAME=[text]        O      naam van de rand, maximaal 20 characters
    
```

2.2.6 DISCHARGES

```

waqua      DISCHARGES
           DISCHARGENAMES
           < DI[iseq]: (CELL[ival] NAME=[text]) >
    
```

```

new DISCHARGENAMES      M      keyword definitie lozingsen
new DI [iseq]          S      lozingsnummer
new CELL [ival]        M      segmentnummer
new NAME=[text]        O      naam het lozingspunt, maximaal 20 characters
    
```

2.3 FLOW

In dit blok wordt informatie gegeven over de waterbewegings parameters:

```
FLOW
    PROBLEM (M)
    VOLUMES (M)
    AREAS (M)
    FLOWS (M)
    DISCHARGES (O)
```

2.3.1 PROBLEM

```
waqua    PROBLEM
          TIMEFRAME
          SYSTEMTIMER=[text]
          DDHHMM
          DATE=[text]
          TSTART=[tval] TSTOP=[tval]
```

	TIMEFRAME	M	keyword definitie simulatietijden
new	SYSTEMTIMER=[text]	D	zie algemene structuren, punt 1
new	DDHHMM	D	zie algemene structuren, punt 1
	DATE=[text]	M	referentiedatum start berekening in 'dd mmm YYYY'
	TSTART=[tval]	M	starttijd berekening in gekozen eenheid of in (dd hh:mm), zie algemene structuren, punt 1.
	TSTOP=[tval]	M	stoptijd berekening in gekozen eenheid of in (dd hh:mm), zie algemene structuren, punt 1.

2.3.2 VOLUMES

```
waqua    VOLUMES
          -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2
          -algemene structuur, punt 3; er moeten NOCELL volumes worden
          opgegeven.
          COMPUTEVOLUMES
```

new	COMPUTE VOLUMES	O	programma berekent volumes, uitgaande van beginvolumes.
-----	-----------------	---	--

2.3.3 AREAS

```
waqua    AREAS
          -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2
          -algemene structuur, punt 3; er moeten net zoveel oppervlakken als
          er uitwisselingen zijn worden opgegeven.
```

2.3.4 FLOWS

```
waqua    FLOWS
          -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2
          -algemene structuur, punt 3; er moeten net zoveel debieten als
          er uitwisselingen zijn worden opgegeven.
```

2.3.5 DISCHARGES

```
waqua    DISCHARGES
          -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2
          FLOW
          -algemene structuur, punt 3; er dienen net zo veel debieten
          als er lozingspunten zijn ingevoerd te worden.
```

new	FLOW	M	lozingsdebiet volgens DELWAQ afspraak
-----	------	---	---------------------------------------

2.4 TRANSPORT

In dit blok wordt de informatie gegeven over de transport parameters:

```

TRANSPORT
  PROBLEM (M)
  METHODVARIABLES (M)
  CHECKPOINTS (O)
  DIFFUSION (M)
  VELOCITIES (O)
  FORCINGS (M)
  USERDATA_TRANSPORT (O)
  
```

2.4.1 PROBLEM

```

PROBLEM
  CONSTITUENTS
    < CO [iseq]: POLUTANT=[text] PUNIT=[text] >
  INACTIVES
    < CO [iseq]: POLUTANT=[text] PUNIT=[text] >
  
```

	CONSTITUENTS	M	keyword definitie 'active' stoffen
	CO [iseq]	S	stofnummer 'active' stof
	POLUTANT=[text]	M	stofnaam, maximaal 20 characters
	PUNIT=[text]	M	eenheid, maximaal 20 characters
new	INACTIVES	O	keyword 'inactieve' stoffen aanwezig
	CO [iseq]	S	stofnummer 'inactive' stof, volgnummer telt door.
	POLUTANT=[text]	M	stofnaam, maximaal 20 characters
	PUNIT=[text]	M	eenheid, maximaal 20 characters

2.4.2 METHODVARIABLES

```

METHODVARIABLES
  TSTEP
    INITIAL=[tval]
    SERIES=[text]
    | FRAME=[tval1] [tval2] [tval3]
    | VALUES=< [val] >
    <
    | < TIME_AND_VALUES=[tval] [val] >
    INTEGRATION=[ival] TRANSOPTION=[ival]
    ITERCON=[val] ITERACCURACY=[val]
    CHECKMASSBALANCE
  
```

	TSTEP	M	tijdstap, niet voor staeedy-state
	INITIAL=[tval]	M	initiele waarde in eenheid systemtimer of (dd hh:mm)
	SERIES=[text]	O	[text]= 'regular' of 'irregular', niet voor constante tijdstap
	FRAME=[tval1] [tval2] [tval3]	O	[tval1] is eerste tijdstip, [tval3] is laatste tijdstip, [tval2] is tijdstap, als [text]='regular'
	VALUES=< [val] >	O	tijdstappen voor alle tijdstippen gedefinieerd in FRAME.
	TIME_AND_VALUES= [tval] [val]	S	tijdstappen op niet-equidistante tijdstippen, als [text]='irregular'.
new	INTEGRATION=[ival]	M	integratie optie 1<=ival<=10
new	TRANSOPTION=[ival]	M	transport optie 0<=ival<=7
	ITERCON=[val]	M	max. aantal iteraties, als INTEGRATION=8 of 9
	ITERACCURACY=[val]	M	nauwkeurigheid, als INTEGRATION=8 of 9
new	CHECKMASSBALANCE	O	controle massa balans

2.4.3 CHECKPOINTS

CHECKPOINTS

< M[iseq]: (CELL[ival] NAME=[text]) >

new	M[iseq]	S	rangnummer monitorpunt
new	CELL[ival]	M	segmentnummer
	NAME=[text]	O	naam monitorpunt

2.4.4 DIFFUSION

DIFFUSION

NARRAY=[ival]  
 POINTER=<[ival]>  
 DISPERSION

-structuur inlezen andere fileformaten, punt 2  
 DISPERX=[val1] DISPERY=[val2] DISPERZ=[val3]  
 < DISPER[iseq]:

-algemene structuur, punt 3; Er dienen net zo veel dispersiecoefficienten als er uitwisselingen zijn te worden opgegeven.

>

new	NARRAY=[ival]	M	aantal dispersiearray's
new	POINTER=<[ival]>	M	per active stof een pointer naar de dispersiearray (indien NARRAY>0).
new	DISPERSION	M	keyword definitie dispersie
new	DISPERX=[val1]	M	dispersiecoefficient x-richting
new	DISPERY=[val2]	M	dispersiecoefficient y-richting
new	DISPERZ=[val3]	M	dispersiecoefficient z-richting
new	DISPER[iseq]	S	rangnummer dispersiearray

2.4.5 VELOCITIES

VELOCITIES

NARRAY=[ival]  
 POINTER=<[ival]>

-structuur inlezen andere fileformaten, punt 2  
 < VELO [iseq]

-algemene structuur, punt 3; er dienen net zo veel snelheuen als er uitwisselingen zijn te worden opgegeven.

>

new	NARRAY=[ival]	M	aantal snelheidsarray's
new	POINTER=<[ival]>	M	per active stof een pointer naar de snelheidarray (indien NARRAY>0).
new	VELO[iseq]	S	rangnummer snelheidsarray

2.4.6 FORCINGS

FORCINGS  
 INITIAL (M)  
 BOUNDARIES (M)  
 DISCHARGES (O)

2.4.6.1 INITIALS

INITIAL  
 CONSTITUENT  
 -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2  
 < CO [iseq]:  
 -algemene structuur, punt 3 m.u.v. tijdsafhankelijke data;  
 er dienen net zo veel concentraties als er segmenten zijn  
 ingevoerd te worden.  
 >

	CONSTITUENT	M	keyword definitie beginconcentraties
new	CO [iseq]	S	rangnummer beginconcentratie

2.4.6.2 BOUNDARIES

BOUNDARIES  
 RETURNTIME  
 -algemene structuur, punt 3 m.u.v. tijdsafhankelijke data; er  
 dienen net zo veel timelags als randen ingevoerd te worden.  
 BOUNDARYVALUES  
 -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2  
 < CO [iseq]:  
 -algemene structuur, punt 3; er dienen net zo veel  
 concentraties als er randen zijn ingevoerd te worden.  
 >

	RETURNTIME	O	keyword definitie timelags
	BOUNDARYVALUES	M	keyword definitie randvoorwaarden
new	CO [iseq]	S	rangnummer randconcentratie

2.4.6.3 DISCHARGES

DISCHARGES  
 DISCHARGEVALUES  
 -structuur inlezen andere fileformaten, punt 2  
 < CO [iseq]:  
 -algemene structuur, punt 3; er dienen net zo veel  
 concentraties als er lozingspunten zijn ingevoerd te  
 worden.  
 >

	DISCHARGEVALUES	M	keyword definitie lozingen
new	CO [iseq]	S	rangnummer gelooste stof



2.4.7 USERDATA\_TRANSPORT

USERDATA\_TRANSPORT

TIMEFRAME

AUXTIMER=[text]  
DDHHMM

REALS

< USER [iseq]=[val] NAME=[text] >

INPUT\_SPATIAL\_DATA

-structuur inlezen andere fileformaten, punt 2

< IS [iseq]: NAME=[text]

-algemene structuur, punt 3 m.u.v. tijdsafhankelijke data; er dienen net zo veel waarden als segmenten ingevoerd te worden.

>

TIMESERIES

-structuur inlezen andere fileformaten, punt 2

< TS [iseq]: NAME=[text]

-algemene structuur, punt 3 voor tijdsafhankelijke data; dienen 1 waarde ingevoerd te worden.

>

TIME\_DEPENDENT\_DATA

-structuur inlezen andere fileformaten, punt 2

< TDS [iseq]: NAME=[text]

-algemene structuur, punt 3; er dienen net zo veel waarden als segmenten ingevoerd te worden.

>

	TIMEFRAME	O	keyword definitie tijden voor functies en segmentfuncties
new	AUXTIMER=[text]	D	zie algemene structuren, punt 1
new	DDHHMM	D	zie algemene structuren, punt 1
	REALS	O	keyword definitie constanten
	USER [iseq]=[val]	S	waarde constante
new	NAME=[text]	O	naam constante, max. 20 characters
	INPUT_SPATIAL_DATA	O	keyword definitie parameters
	IS [iseq]	S	volgnummer parameter
new	NAME=[text]	O	naam parameter, max. 20 characters
	TIMESERIES	O	keyword definitie functies
	TS [iseq]	S	volgnummer functie
new	NAME=[text]	O	naam functie, max. 20 characters
	TIME_DEPENDENT_DATA	O	keyword definitie segmentfuncties
	TDS [iseq]	S	volgnummer segmentfunctie
new	NAME=[text]	O	naam segmentfunctie, max. 20 characters

2.5 DISPLAYS

In dit blok wordt de informatie gegeven over de (grafische) uitvoer:

DISPLAYS

GRIDDISP

-structuur inlezen andere fileformaten, punt 2  
MMAX=[ival1] NMAX=[ival2]  
GRID=< CELL[ival]>

	GRIDDISP	O	keyword definitie griduitvoer
new	MMAX=[ival1]	M	aantal kolommen
new	NMAX=[ival2]	M	aantal rijen
new	GRID=<CELL[ival]>	M	segmentnummers grid

## 2.6 SDSOUTPUT

In dit blok wordt de informatie gegeven over de opslag van berekeningsresultaten:

```
SDSOUTPUT (of BINOUTPUT)
  MAPS (O)
  HISTORIES (O)
  RESTART (O)
```

Wanneer dit blok wordt weggelaten wordt de default uitvoer aangemaakt.

### 2.6.1 MAPS

```
MAPS
  TFMAPS=[tval1] TIMAPS=[tval2] TLMAPS=[tval3]
  MAPDATA
    < M[iseq] NAME=[text] >
  NEFISMAP
```

	TFMAPS=[tval1]	M	starttijd MAP-file
	TIMAPS=[tval2]	M	tijdstap MAP-file
	TLMAPS=[tval3]	M	stoptijd MAP-file
	MAPDATA	O	keyword definitie MAP uitvoer
new	M[iseq]	S	rangnummer MAP uitvoer
new	NAME=[text]	M	naam MAP uitvoer variabele, gelijk aan concentratie- of parameter naam of 'VOLUMES'
new	NEFISMAP	O	MAP file in NEFIS formaat, default = binair.

Wanneer de MAPDATA wordt weggelaten wordt de default MAP uitvoer aangemaakt.

### 2.6.2 HISTORIES

```
HISTORIES
  TFHISTO=[tval1] TIHISTO=[tval2] TLHISTO=[tval3]
  HISTORYDATA
    < H[iseq] TEXT=[text] >
  NEFISHIS
```

	TFHISTO=[tval1]	M	starttijd HIS-file
	TIHISTO=[tval2]	M	tijdstap HIS-file
	TLHISTO=[tval3]	M	stoptijd HIS-file
	HISTORYDATA	O	keyword definitie HIS uitvoer
new	H[iseq]	S	rangnummer HIS uitvoer
new	NAME=[text]	M	naam HIS uitvoer variabele, gelijk aan concentratie- of parameter naam of 'VOLUMES'
new	NEFISHIS	O	HIS file in NEFIS formaat, default = binair.

Wanneer de HISTORYDATA wordt weggelaten wordt de default HIS uitvoer aangemaakt.

### 2.6.3 RESTART

```
RESTART
  TFRESTART=[tval1] TIRESTART=[tval2] TLRESTART=[tval3]
```

	TFRESTART=[tval1]	M	starttijd RESTART-file
	TIRESTART=[tval2]	M	tijdstap RESTART-file
	TLRESTART=[tval3]	M	stoptijd RESTART-file

2.7 PRINTOUTPUT

In dit blok wordt de informatie gegeven over de inhoud van de monitorfile:

```
PRINTOUTPUT
  MONITOR (O)
  GRID (O)
```

Wanneer dit blok wordt weggelaten wordt de default uitvoer aangemaakt.

2.7.1 MONITOR

```
MONITOR
  TFMON=[tval1] TIMON=[tval2] TLMON=[tval3]
  MONITORDATA
    < M[iseq] NAME=[text] >
```

	TFMON=[tval1]	M	starttijd MONITOR-file
	TIMON=[tval2]	M	tijdstap MONITOR-file
	TLMON=[tval3]	M	stoptijd MONITOR-file
new	MONITORDATA	O	keyword definitie MONITOR uitvoer
new	M[iseq]	S	rangnummer MONITOR uitvoer
new	NAME=[text]	M	naam MON uitvoervariabele, gelijk aan concentratie- of parameter naam of 'VOLUMES'

Wanneer de MONITORDATA wordt weggelaten wordt de default MONITOR uitvoer aangemaakt.

2.7.2 GRID

```
GRID
  TFGRID=[tval1] TIGRID=[tval2] TLGRID=[tval3]
  GRIDDATA
    < G[iseq] TEXT=[text] >
```

new	TFGRID=[tval1]	M	starttijd GRID-file
new	TIGRID=[tval2]	M	tijdstap GRID-file
new	TLGRID=[tval3]	M	stoptijd GRID-file
new	GRIDDATA	O	keyword definitie GRID uitvoer
new	M[iseq]	S	rangnummer GRID uitvoer
new	NAME=[text]	M	naam GRID uitvoervariabele, gelijk aan concentratie- of parameter naam of 'VOLUMES'

Wanneer de GRIDDATA wordt weggelaten wordt de default MONITOR uitvoer aangemaakt.

### 3. Vergelijking met WAQMMF

In hoofdstuk 2 is de volledige DELWAQ invoerfile beschreven met behulp van SIMONA keywords. Hierbij is aangegeven welke data aangeleverd kan worden door WAQUA(-in-Simona).

In de 'User's guide WAQMMF' wordt de inhoud van een interfacefile beschreven ten behoeve van ecologische modellering met DELWAQ. De gegevens voor deze interfacefile worden aangeleverd door WAQUA(-in-Simona).

Wanneer de in deze memo beschreven invoerfile vergeleken wordt met de interfacefile van WAQMMF kunnen de volgende opmerkingen gemaakt worden:

*Niet beschikbaar in WAQMMF, wel nodig voor DELWAQ:*

- begintijd en eindtijd van de simulatie
- tijdstap van de simulatie
- van- en naar-lengtes uitwisselingen

*Aangepassing in WAQMMF:*

- de beschrijving van COMPARTMENTS is vereenvoudigd. Voor DELWAQ is slechts het aantal segmenten nodig. Er moet nog overwogen worden of een beschrijving van het rooster zoals in WAQMMF wordt gegeven (of een alternatief) nodig is voor de weergave van modelresultaten of voor koppeling met DIDO.
- Bij INTERFACES wordt geen informatie over de (x,y,z-)richting van de uitwisselingen gegeven. Toegevoegd moet worden: het aantal uitwisselingen per richting.
- Bij INTERFACES moet ten behoeve van sommige hogere orde schema's per uitwisseling het 'van-1' en 'naar+1' segmentnummer opgegeven worden.
- Bij INTERFACES moeten de randen een uniek negatief nummer krijgen, in plaats van alle randen het nummer -1.
- WAQMMF kan alleen ASCII data inlezen. Zeker voor grotere hoeveelheden data moet een mogelijkheid geboden worden om de gegevens binair aan te bieden.
- De gebruikte structuur voor tijdsafhankelijke parameters is te beperkt in WAQMMF.  
Alle tijdsafhankelijke parameters moet in WAQMMF voor dezelfde tijdstippen ingevoerd worden. In DELWAQ kan iedere tijdsafhankelijke parameters met een aparte tijdreeks (of onafhankelijk van de tijd) ingevoerd worden.

Bijlage: Voorbeeld van tijds- en plaatsafhankelijke invoer

1. Invoer debieten

Stel: aantal uitwisselingen = 3  
DDHHMM optie in gebruik

FLows

TIME\_FUNCTIONS

TIMESERIES

TS: ISEQ=1 # debieten voor uitwisseling 1  
SERIES='regular'  
FRAME=0 0:00,0 0:10,0 1:00  
VALUES=100., 101., 100., 99., 101., 100., 99.

TS: ISEQ=3 # debieten voor uitwisseling 3  
SERIES='irregular'  
TIME\_AND\_VALUES=0 0:00 100.  
TIME\_AND\_VALUES=0 0:30 101.  
TIME\_AND\_VALUES=0 0:45 99.  
TIME\_AND\_VALUES=0 1:00 100.

FOURIER

F: ISEQ=2 # debieten voor uitwisseling 2  
AZERO=100.  
AMPL=1.0 0.8  
OMEGA=0.224 0.448  
PHASE=0.1 0.12

2. Invoer lozingen

Stel: aantal lozingen = 2  
totaal aantal stoffen in model = 10  
aantal stoffen in lozing = 2 (stof 1 en stof 7)  
DDHHMM optie niet in gebruik  
SYSTEMTIMER='minutes'

DISCHARGES

DISCHARGEVALUES

CO 1:

TIMESERIES

TS: ISEQ=1 # stof 1, lozing 1  
SERIES='regular'  
FRAME=0.,10.,60.  
VALUES=0.,10.,10.,10.,0.,0.,0.  
BLOCKFUNCTION

TS: ISEQ=2 # stof 1, lozing 2  
SERIES='regular'  
FRAME=0.,10.,60.  
VALUES=0.,20.,20.,20.,20.,0.,0.

CO 7:

TIMESERIES

TS: ISEQ=1 # stof 7, lozing 1  
SERIES='irregular'  
FRAME=0.,10.,60.  
TIME\_AND\_VALUES=0. 0.  
TIME\_AND\_VALUES=30. 100.  
TIME\_AND\_VALUES=45. 0.  
TIME\_AND\_VALUES=60. 0.  
BLOCKFUNCTION

TS: ISEQ=2 # stof 7, lozing 2  
SERIES='regular'  
FRAME=0.,10.,60.  
VALUES=0.,200.,200.,200.,200.,0.,0.

# concentratie overige stoffen = 0 (default)  
# debieten staan in FLOW, DISCHARGES



**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

