

073

Opdrachtgever:

Rijkswaterstaat


Rijksinstituut voor Kust en Zee

Processen en Transport in MARS

Versie 3.00

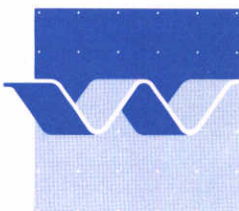
Documentatie Model

April 1994

	bibliotheek postbus 177 - 2600 MH Delft waterloopkundig laboratorium/WL
BB	68755
WL	T 1073 VERVALTEN
EXPL	VERVAL R0002036

Processen en Transport in MARS

Versie 3.00



Inhoud

Symbolenlijst

		blz.
<u>1</u>	<u>Introductie</u>	1
<u>2</u>	<u>Hydrodynamica</u>	2
2.1	Cyclische 2DH velden	2
2.2	Ontbinding in Fourierreeksen	3
2.3	Reconstructie tijdens de berekening	3
2.3.1	Reconstructie uit de Fouriertermen	3
2.3.2	Berekening van de actuele stroomsnelheid uit de cyclische snelheidsvelden	4
2.3.3	Interpolatie van de actuele snelheid op een willekeurig punt uit de snelheden op de gridpunten	6
2.4	Uitbreiding naar quasi 3D	6
2.4.1	Profiel ten gevolge van bodemwrijving	6
2.4.2	Profiel ten gevolge van de wind	7
<u>3</u>	<u>Processen</u>	8
3.1	Verdamping	8
3.1.1	Olie	8
3.1.2	Andere chemicaliën	9
3.2	Natuurlijke dispersie	9
3.2.1	Olie	9
3.2.2	Andere chemicaliën	10
3.3	Sedimentatie	10
3.4	Oplossen	11
3.5	Resuspensie	11
3.6	Adsorptie/desorptie	13
3.7	Afbraak	13
<u>4</u>	<u>Transport</u>	15
4.1	Advectie	15
4.2	Autonome verspreiding	15
4.2.1	Olie	15
4.2.2	Andere chemicaliën	16
4.3	Uitzakken	16
4.4	Dispersie	17
4.4.1	Horizontale dispersie	17
4.4.2	Verticale dispersie	18
4.4.3	Tijdstapgrootte	19
4.4.3.1	Advectie	20
4.4.3.2	Verspreiding	20
4.4.3.3	Uitzakken	20
4.4.3.4	Horizontale dispersie	20
4.4.3.5	Verticale dispersie	21
4.4.4	Grootte van de telhokjes	21
	<u>Referenties</u>	23

Symbolenlijst

C_z	- chezy coëfficiënt	$[n^2/S]$
CD	- windschuifspanningscoëfficiënt	
F_1	- coëfficiënt in relatie tussen τ en v_w	$[kg/m^3]$
F_2	- coëfficiënt in relatie tussen τ en v_w	$[kg s /m^4]$
K_{nd}	- coëfficiënt voor de natuurlijke dispersie	$[/s]$
K_1	- virtuele dispersiecoëfficiënt	$[m^2/s]$
M_i	- molaire massa van oliecomponent i	$[kg/kmol]$
M_o	- door lozing vrijgekomen massa	$[kg]$
$M(t)$	- totale massa van een stof in het systeem	$[kg]$
N_i	- verdampingssnelheid van oliecomponent $i, i=5, 6, \dots, 15$	$[kg/(m^2s)]$
R_a	- molaire gasconstante	$[J/(kmolK)]$
$R(t)$	- straal van drijvende olievlek in TRANSSPILL-formulering (Bommelé, 1988)	$[m]$
T	- temperatuur van de olie	$[K]$
T_{50}	- halfwaarde tijd voor afbraak	$[s]$
T_o	- periode van de cyclische velden	$[s]$
T_z	- verticale mengtijd	$[s]$
$V(t)$	- volume van de oliedrijflaag	$[m^3]$
V_o	- volume van de hoeveelheid vrijgekomen olie	$[m^3]$
a, r, γ	- parameters in windprofiel	
f_o	- $= 1/T_o$	$[Hz]$
f_{zoom}	- zoomfactor	
g	- zwaartekrachtversnelling	$[m^2/s]$
$h(x, y, t)$	- diepte onder referentievlak	$[m]$
$h'(x, y, t)$	- totale waterstand	$[m]$
k	- afbraakcoëfficiënt	$[/s]$
m	- aantal Fourier-termen die naast de gemiddelde waarde opgeslagen zijn	
p	- parameter in horizontale dispersieformule	
P_{atm}	- atmosferische druk	$[Pa]$
q	- "graad" van snelheidsverdeling over vertikaal	
t	- tijd	$[s]$
t_L	- "leeftijd" van een deeltje geschaald op 1 s.	

Symbolenlijst

u_{cr}	- kritische snelheden voor resuspensie	[m/s]
$\underline{u}(x,y,t)$	- snelheidsvector in 2DH modellen	[m/s]
$u(x,y,t), v(x,y,t)$	- componenten van \underline{u} in x-, resp. y-richting	[m/s]
v_s	- valsnelheid	[m/s]
$\underline{v}_w(t)$	- windsnelheidsvector	[m/s]
x	- coördinaat in 1e richting	[m]
y	- coördinaat in 2e richting	[m]
μ	- dieptecoördinaat, geschaald op h' , dus $0 \leq \mu \leq 1$ $\mu=0$ op bodem, $\mu=1$ aan oppervlak	
$\underline{u}^{3D}(x,y,z,t)$	- snelheidsvector in quasi 3D model	[m/s]
$\underline{\tilde{u}}(x,y,z,t)$	- quasi 3D snelheidsvector t.g.v. bodem wrijving	[m/s]
z	- coördinaat in 3 ^e (verticale) richting	[m]
$\zeta(x,y,t)$	- waterstand t.o.v. referentievlak	[m]
φ	- windrichting, gerekend vanaf het noorden; $\varphi=\frac{1}{2}\pi$ voor wind uit het oosten	
τ	- grootte van de (wind)schuifspanning	[N/m ²]
$\Delta \underline{s}(x,y,z,t)$	- horizontale verplaatsingsvector	[m]
Δs_r	- grootte van de verplaatsing t.g.v. dispersie	[m]
φ_R	- "random" hoek	
Δt	- rekentijdstap	[s]
τ_λ	- parameter in horizontale dispersieformule	
α_o	- parameter in horizontale dispersieformule	
Δz	- verplaatsing in verticale richting	[m]
Δz_r	- "random" verticale verplaatsing	[m]
ρ_w	- dichtheid van water	[kg/m ³]
$\rho_o(t)$	- dichtheid van olie	[kg/m ³]
σ	- de netto oppervlaktetension	[N/m]
ν_w	- kinematische viscositeit van water	[m ² /s]
$\nu_o(t)$	- kinematische viscositeit van olie	[m ² /s]

Symbolenlijst

ρ_i	- dichtheid van oliecomponent i	[kg/m ³]
ΔV	- toename van het volume van de olie drijflaag in Δt	[m ³]
Δ	- maaswijdte hydrodynamisch grid; $\Delta = \max (\Delta x, \Delta y)$	[m]
Δx	- gridafstand in x-richting	[m]
Δy	- gridafstand in y-richting	[m]

1 Introductie

In deze notitie worden de proces- en transportformuleringen beschreven zoals zij in MARS 3.00 (7, 8) gebruikt worden. Verder wordt van elke formulering de parameters en de parameterwaarden, voorzover die niet door de gebruiker gekozen kunnen worden, gegeven.

De notitie is opgedeeld in drie hoofdstukken, die behandelen respectievelijk

- Hydrodynamica
- Processen (een proces is hier de overgang van het ene naar het andere compartiment, of de overgang van de ene toestand naar de andere, of de omzetting van de ene groep stoffen in de andere groep).
- Transport (onder transport wordt de verplaatsing binnen een compartiment verstaan).

De notitie is geschreven door R.J. Diependaal en voor MARS3.00 aangepast door R.J. Vos.

2 Hydrodynamica

Voor de waterbeweging wordt gebruik gemaakt van negen cyclische snelheids- en waterstandsvelden die door WAQUA berekend zijn. Deze velden zijn tweedimensionale diepte-gemiddelde velden (2DH). Vervolgens worden u , v , en h' per grid-punt ontbonden in Fouriercomponenten. De coëfficiënten van de meest significante termen uit de reeksen worden opgeslagen. MARS 3.00 verwacht deze Fouriertermen als invoer. Tijdens de berekening worden u , v en h' uit de opgeslagen Fouriertermen gereconstrueerd. Daarna wordt er tussen de vijf velden geïnterpoleerd en geëxtrapoleerd om de u , v en h' te verkrijgen die bij de actuele meteorologische conditie passen. Indien de gebruiker dit wenst, wordt er een quasi drie-dimensionale (3D) benadering ingebracht door de berekende 2DH grootheden aan te passen volgens twee profielen: een windprofiel en een profiel ten gevolge van bodemwrijving.

2.1 Cyclische 2DH velden

De WAQUA-berekeningen leveren de snelheidscomponenten u en v en de waterstand h' . Negen cyclische velden worden er gebruikt:

1. geen wind ($\|\underline{v}_w\| = 0$)
- 2.-5. Vier velden met wind uit verschillende richtingen bij 10.0 m/s;
nl. NO, ZO, ZW en NW:
 $\underline{v}_{w,i}, \phi_i, i = 1,4$
- 6.-9. Vier velden met wind uit verschillende richtingen bij 20.0 m/s;
nl. NO, ZO, ZW en NW:
 $\underline{v}_{w,i}, \phi_i, i = 5,8$

De cyclische velden hebben als hoofdcomponent M2 met een getijperiode van 12uur en 30 minuten. Er wordt geen onderscheid meer gemaakt tussen laag en hoog tij zoals in MARS2.01.

2.2 Ontbinding in Fouriercomponenten

WAQUA-berekeningen van 12,5 uur zijn getransformeerd. Daar de tijdstap in de berekening 10 minuten is bevat de volledig getransformeerde Fourierreeks 72 componenten ($N=72$). Wij gebruiken de vijf belangrijkste Fouriercomponenten voor terugtransformatie van de getransformeerde velden. Het is belangrijk dat de 'voorwaartse' Fouriertransformatie met een routine gebeurt die conventies hanteert die passen bij de 'terug'-transformatie waarop MARS3.00 gebaseerd is. *Deze conventies (fase-factoren en norm-factoren) wijken af van de implementatie van eerdere versies van MARS.* De voorwaartse transformatie die wij gebruiken hebben is gegeven in (5), zij het dat wij de symmetrische normalisering gebruikt in (5) met $1/N^{1/2}$ in de 'voorwaartse' transformatie ongedaan hebben gemaakt (zie ook &2.3.1).

2.3 Reconstructie tijdens de berekening

2.3.1 Reconstructie uit de Fouriertermen

Op elk gridpunt (x, y) wordt $f(x, y, t)$, waarbij f staat voor u , v , of h' , uit de opgeslagen Fouriertermen gereconstrueerd. De Fouriertermen zijn per punt als volgt opgeslagen:

$A_0, B_0,$

en vervolgens voor $k = 1, m$

$n_k, A_{n_k}, B_{n_k}.$

De functie f wordt 'her'berekend met de formule

$$f(x,y,t) = A_0 + \sum_{k=1}^m \left\{ A_{n_k} \cos[2\pi n_k f_0 t] - B_{n_k} \sin[2\pi n_k f_0 t] \right\},$$

waarin $f_0 = 1/T_0$, met T_0 de periode van het cyclische veld. Merk op dat het nummer van de frequentiecomponent (n_k) voor elk vak verschillende waarden kan hebben (parameters: $m = 5$ en $T_0 = 12$ uur en 30 minuten).

Merk op dat we in MARS3.00 bij het wegschrijven van de 'voorwaartse' transformatie normaliseren voor de 'terugwaartse' transformatie met een factor $1/N$ voor de DC-component, en een factor $2/N$ voor de AC-componenten. Merk ook het min-teken op in de formule dat verschilt van eerdere versies van MARS.

2.3.2 Berekening van de actuele stroomsnelheid uit de cyclische snelheidsvelden

Interpolatie wind

Dit betreft interpolatie op 9 (fouriergetransformeerde) windvelden voor WAQUA/GENO. Hierbij is uitgegaan van een windschuifspanningscoëfficiënt CD volgens Smith en Banke:

$$CD = (F1 + (F2 V_w))$$

met: F1 = $6.3 \cdot 10^{-4}$
 F2 = $6.6 \cdot 10^{-5}$
 V_w = windsnelheid (m/s)
 CD = windschuifspanningscoëfficiënt

De windschuifspanning behorende bij een zekere windsnelheid is:

$$\tau = CD V_w^2$$

met: τ = windschuifspanning (N/m²)

De nieuwe procedure gebruikt bovenstaande formules om bij een gegeven actuele windsnelheid, de windschuifspanning te bepalen. Vervolgens wordt de windschuifspanning gebruikt als grootte om snelheden en waterstanden te bepalen volgens een lineaire interpolatiemethode. De windvelden die bekend zijn binnen MARS en de zogenaamde 'steunpunten' van de interpolatiemethodiek zijn, zijn:

- 1 veld bij 0 m/s
- 4 velden bij 10 m/s, te weten NW, NO, ZW, ZO
- 4 velden bij 20 m/s, te weten NW, NO, ZW, ZO

De interpolatie procedure voor het bepalen van snelheden u,v en waterstand H, bij windrichting ϕ en windschuifspanning τ is als volgt:

1. Bepaal tussen welke twee bekende windrichtingen (NW, NO, ZW, ZO) het actuele windveld zich bevindt. Deze twee windhoeken noemen we ϕ_1 en ϕ_2 .
2. Bepaal voor elk van deze windhoeken de snelheidscomponenten u en v en de waterstand H volgens lineaire interpolatie op de windschuifspanning. De windschuifspanning is hierbij berekend volgens de bovengenoemde formuleringen.

Bijvoorbeeld voor de snelheid in u-richting voor hoek ϕ_1 geldt:

$$u^{(\phi_1)}(\tau) = \frac{(\tau - \tau_b)}{(\tau_a - \tau_b)} u^{(\phi_1)}(\tau_a) + \frac{(\tau_a - \tau)}{(\tau_a - \tau_b)} u^{(\phi_1)}(\tau_b)$$

Hierbij geldt dat de windsnelheid ligt tussen een snelheid V_{w_a} met schuifspanning τ_a en een snelheid V_{w_b} met schuifspanning τ_b .

De u-snelheid voor hoek ϕ_2 wordt nu op gelijke wijze bepaald. De procedure voor beide hoeken wordt tevens uitgevoerd voor de v-snelheid en de waterstand.

3. Gegeven de resultaten van stap 2. wordt nu de u-snelheid bij de actuele hoek ϕ bepaald. Ook hier wordt een simpele lineaire interpolatiemethode gebruikt:

$$u^{(\phi)}(\tau) = \frac{(\phi - \phi_1)}{(\phi_2 - \phi_1)} u^{(\phi_2)}(\tau) + \frac{(\phi_2 - \phi)}{(\phi_2 - \phi_1)} u^{(\phi_1)}(\tau)$$

Deze procedure wordt herhaald voor 'v' en 'H'.

Voor een windsnelheid tussen 0 m/s en 10 m/s wordt voor het steunpunt bij 0 m/s eenzelfde waarde ingevoerd voor beide windhoeken ϕ_1 en ϕ_2 . Voor windsnelheden boven de 20 m/s worden de windsnelheden bij 10 en 20 m/s gebruikt. Voor deze windsnelheden is de procedure een *extrapolatiemethode* gebaseerd op lineair gedrag van de windschuifspanning tussen 10 en 20 m/s.

2.3.3 Interpolatie van de actuele snelheid op een willekeurig punt uit de snelheden op de gridpunten

In MARS3.00 wordt uitgegaan van een equidistant rechthoekig grid voor de hydrodynamica. Van een punt (x,y) wordt eerst bepaald van welke gridpunten informatie gebruikt wordt voor de interpolatie; zie figuur 1 voor de notatie. Voor het in figuur 1 getekende punt (x,y) wordt voor $u(x,y,t)$ lineair geïnterpoleerd tussen $u_{i,j-1}$ en $u_{i,j}$, i.e. de (constante) snelheden op de zijden van deze gridcel. De component $v(x,y,t)$ wordt geïnterpoleerd tussen $v_{i,j-1}$ en $v_{i,j}$. Voor lineaire interpolatie van u voor het punt in figuur 1 geldt de volgende formule:

$$u(x,y,t) = \frac{(y-y_{j-1})}{(y_j-y_{j-1})} u_{i,j} + \frac{(y_j-y)}{(y_j-y_{j-1})} u_{i,j-1}$$

2.4 Uitbreiding naar quasi 3D

Op twee manieren wordt de 2D snelheid $\underline{u}(x,y,t)$ getransformeerd naar een quasi 3D snelheid $\underline{u}^{3D}(x,y,\mu,t)$. Wij schrijven twee profielen voor: een ten gevolge van de bodemwrijving en een ten gevolge van de wind.

2.4.1 Profiel ten gevolge van bodemwrijving

Wij definiëren een 3D snelheid $\underline{u}(x,y,\mu,t)$ door middel van het zgn. van Veen profiel:

$$\underline{u}(x,y,\mu,t) = \underline{u}(x,y,t) \cdot \frac{q+1}{q} \mu^{1/q}$$

De dieptecoördinaat μ loopt van 0 (aan de bodem) tot 1 (aan het oppervlak).

Merk op dat

$$\int_0^1 \underline{u}(x,y,\mu,t) dz = \underline{u}(x,y,t).$$

Parameter: q

De huidige verstekwaarde voor q is 6.

Reële waarden voor q liggen tussen 1 en 8. Kleine waarden voor q ($=1$) corresponderen met een zwaar gestratificeerde waterkolom. Grote waarden voor q ($=8$) komen overeen met een gemengde situatie.

2.4.2 Profiel ten gevolge van de wind

Wij veronderstellen een door de wind geïnduceerd snelheidsveld van de vorm

$$a \underline{v}_w(t) \left\{ \frac{1+\gamma}{\gamma-r} \mu^\gamma + \frac{1+r}{r-\gamma} \mu^r \right\}.$$

De dieptecoördinaat μ loopt van 0 (aan de bodem) tot 1 (aan het oppervlak).

Dit profiel kan gedacht worden als een som van twee profielen van dezelfde soort vorm als dat beschreven in paragraaf 2.4.1. Het ene profiel is geprononceerd (γ is relatief groot) en wordt gecompenseerd door een vlakker verlopemd profiel (r is relatief klein).

Merk in dit verband op dat

$$\int_0^1 a \underline{v}_w \left\{ \frac{1+\gamma}{\gamma-r} \mu^\gamma + \frac{1+r}{r-\gamma} \mu^r \right\} d\mu = 0.$$

Parameters: a, γ, r

De huidige waarden zijn

$$a = 0.03$$

$$\gamma = 1/6$$

$$r = 5$$

De som van γ en r bepaalt de stijlheid van het profiel aan het wateroppervlak; hoe groter de som, hoe het stijler het profiel. Het verschil ($\gamma - r$) bepaalt de doordringdiepte van de wind; hoe kleiner dit verschil, hoe groter de doordringdiepte.

Het totale 3D snelheidsveld volgt uit de vectoriële sommatie:

$$\underline{u}^{3D}(x, y, \mu, t) = \frac{q+1}{q} \mu^{1/q} \underline{u}(x, y, t) + a \left\{ \frac{1+\gamma}{\gamma-r} \mu^\gamma + \frac{1+r}{r-\gamma} \mu^r \right\} \underline{v}_w(t).$$

3. Processen

Wij definiëren een proces als de overgang van het ene naar het andere compartiment, of als een overgang van de ene toestand naar de andere, of als de omzetting van de ene groep stoffen in de andere groep.

In het algemeen kunnen de volgende processen onderscheiden worden:

- verdamping; overgang van drijfslaag naar lucht.
- natuurlijke dispersie; overgang van drijfslaag naar waterkolom.
- sedimentatie; overgang van waterkolom naar bodem.
- oplossen; overgang van waterkolom (suspensie) naar de waterkolom (opgelost).
- resuspensie; overgang van bodemlaag naar waterkolom.
- adsorptie/desorptie; het hechten van deeltjes van andere stoffen en omgekeerd.
- afbraak; het omzetten van een stof in andere stoffen.

3.1 Verdamping

In MARS 3.00 wordt onderscheid gemaakt tussen verdamping van olie en andere chemicaliën, zij het dat de verdamping van niet-olieachtige stoffen niet is ingebouwd in MARS3.00.

3.1.1. Olie

Wij gebruiken dezelfde formulering voor de verdamping van olie als door Bommelé (1988) gebruikt is. De olie wordt verdeeld gedacht in 16 componenten, onderscheiden naar de lengte van de koolstofketens (C1 t/m C15, C16 en zwaarder). In navolging van Bommelé (1988) worden de volgende aannamen gedaan:

- De componenten C1 t/m C4 verdampen instantaan op het moment van lozing;
- De componenten C16 en zwaarder verdampen niet;
- De componenten C5 t/m C15 verdampen ieder met verdampingssnelheid N_i , waarbij N_i een functie is van $|\underline{v}_w|$, R , M_i , p_{atm} , R_a , T .

Voor de precisie formulering verwijzen wij naar Bommelé (1988). De straal R volgt uit de differentiaalvergelijking zoals beschreven in subsectie 4.2.1. Wij weten nu op elk tijdstip hoeveel olie er door verdamping uit het systeem verdwenen is. De op elk moment nog in het systeem aanwezige massa wordt over het aantal deeltjes verdeeld.

Parameters: $|\underline{v}_w|$, R , M_i , p_{atm} , R_a , T .

In de huidige situatie hebben de parameters de volgende waarden:

$|\underline{v}_w|$ = wordt door de gebruiker opgegeven

M_i = } wordt voor betreffende oliesoort uit een database opgehaald;
 p_i = } de oliesoort wordt door de gebruiker opgegeven

p_{atm} = 101300 Pa

R_a = 8314 J/(kmol.K)

T = wordt door de gebruiker opgegeven

3.1.2 Andere chemicaliën

Niet in MARS 3.00 ingebouwd.

3.2. Natuurlijke dispersie

Wij maken weer onderscheid tussen olie en andere chemicaliën.

3.2.1 Olie

De 'natuurlijke' dispersie van olie (gebaseerd op andere processen dan turbulentie) wordt gemodelleerd (Bommelé, 1980) volgens

$$\frac{dV(t)}{dt} = K_{nd} V,$$

waarin

$$K_{nd} = - 7.6 \cdot 10^{-5} v_o^{-0.62} [0.25 |\underline{v}_w| - 0.46]$$

De factor tussen rechte haken representeert het effect van de golfhoogte. Hieruit wordt van elke tijdstap de volume fractie bepaald die disperseert door de benadering

$$\frac{\Delta V}{V} = K_{nd} \Delta t$$

Dan wordt voor elk oliedeeltje "random" een getal getrokken uit de uniforme verdeling op $[0,1)$. Is dit getal $< |K_{nd} \Delta t|$, dan gaat dit deeltje over van de drijfslaag naar de waterkolom; anders blijft het deeltje in de drijfslaag.

Parameters: $|v_w|$, V_o

In de huidige situatie hebben de parameters de volgende waarden

$\left| \frac{v_w}{V_o} \right|$) worden door de gebruiker opgegeven

3.2.2 Andere chemicaliën

Niet in MARS 3.00 ingebouwd.

3.3 Sedimentatie

Het sedimentatie algoritme in MARS3.00 is anders dan in eerdere versies. Voorheen kwam een vallend deeltje ('uitzakken' zie sectie 4.3) altijd op de bodem terecht. In het nieuwe model wordt echter met schuifspanningen gewerkt en wordt rekening gehouden met een kritische waarde voor sedimentatie.

Deeltjes worden over de verticaal verplaatst als gevolg van random processen (dispersie) en als gevolg van deterministische processen ('vallen' als gevolg van gravitatie). Het is belangrijk op te merken dat deeltjes die door verticale random verplaatsing de bodem raken, niet kunnen sedimenteren in MARS. Deze deeltjes worden aan de bodem gereflecteerd. In een tijdstap wordt eerst de verticale random verplaatsing uitgevoerd, en daarna de verticale deterministische verplaatsing.

Voor een deeltje dat als gevolg van zijn valsnelheid (een stofafhankelijke invoerparameter) de bodem raakt wordt gekeken of het deeltje voldoende kinetische energie heeft om de bodemschuifspanning te overwinnen, en aldus middels reflectie in oplossing te blijven. De kinetische energie van het

deeltje wordt vertaald in een bodemschuifspanning τ_b middels de relatie:

$$\tau_b = \frac{\rho g \sqrt{(U_x^2 + U_y^2)}}{C_z^2}$$

met:	U_x	=	snelheid in x-richting van het deeltje (m/s)
	U_y	=	snelheid in y-richting van het deeltje (m/s)
	ρ	=	dichtheid van water (kg/m ³)
	g	=	gravitatieconstante (m/s ²)
	C_z	=	Chezy-coëfficiënt (m ^{1/2} /s)
	τ_b	=	bodemschuifspanning van het deeltje (Pa)

Is nu $\tau_b > \tau_b^{crit}$ dan zal het deeltje aan de bodem reflecteren. Zo niet dan kan het deeltje sedimenteren. De kans P_{sed} dat een deeltje sedimenteert is nu gegeven door:

$$P_{sed} = 1 - \frac{\tau_b}{\tau_b^{crit}} \quad (0 < \tau_b < \tau_b^{crit})$$

$$P_{sed} = 0 \quad (\tau_b > \tau_b^{crit})$$

Deze kans wordt door een random trekking van een getal R op het interval (0,1) in rekening gebracht. Is dit random getrokken getal R groter dan P_{sed} dan zal het deeltje sedimenteren, zo niet dan wordt het deeltje gereflecteerd.

3.4 Oplossen

Niet in MARS 3.00 ingebouwd.

3.5 Resuspensie

Het algoritme voor erosie werd gewijzigd in MARS3.00. Allereerst wordt met schuifspanningen gewerkt in plaats van met snelheden. Ten tweede worden in een lokale omgeving zoveel deeltjes losgelaten als overeenkomt met de resuspensiesnelheid van de bodem (een invoerparameter).

Aan het begin van een tijdstap wordt allereerst voor het gebied waar deeltjes op de bodem liggen bekeken of de bovengenoemde bodemschuifspanning τ_b (berekend op gemiddelde diepte) groter is dan de kritische waarde voor erosie τ_e^{crit} . Er wordt een telraam gebruikt met bepaalde maaswijdte Δx en Δy en een bepaald aantal telvakjes, om te bepalen hoeveel massa M_e kan eroderen. Voor vak (k) van dit telraam is de erodeerbare massa $M_e^{(k)}$ gegeven door:

$$M_e^{(k)} = M \Delta x \Delta y \Delta t \left(\frac{\tau_b}{\tau_e^{crit}} - 1 \right) \quad (\tau_b > \tau_e^{crit})$$

$$M_e^{(k)} = 0 \quad (\tau_b < \tau_e^{crit})$$

Hierin is:

$M_e^{(k)}$	=	erodeerbare massa voor vak k van het telraam (kg)
M	=	resuspensiesnelheid (kg/m ² /s)
Δt	=	grootte tijdstap (s)
$\Delta x \Delta y$	=	oppervlakte van het telvak (m ²)
τ_b	=	bodemschuifspanning op gemiddelde diepte in telvak (Pa)
τ_e^{crit}	=	kritische bodemschuifspanning (Pa)

Tijdens de tijdstap worden nu deeltjes die een bodemschuifspanning hebben die groter is dan τ_e^{crit} geërodeerd totdat de totale erodeerbare massa van een vak is bereikt. Is deze waarde bereikt dan stopt het erosieproces voor dit vak.

Het telraam is een rooster dat gelegd wordt tussen de coördinaten (x_{min}, y_{min}) en (x_{max}, y_{max}) , waarbij:

x_{min}	=	minimale x-coördinaat van alle deeltjes op de bodem
x_{max}	=	maximale x-coördinaat van alle deeltjes op de bodem
y_{min}	=	minimale y-coördinaat van alle deeltjes op de bodem
y_{max}	=	maximale y-coördinaat van alle deeltjes op de bodem

De ligging van het rooster wordt elke tijdstap opnieuw bepaald. De assen van het rooster zijn altijd evenwijdig aan de x- en y-as van het WAQUA/GENO grid. Het aantal vakjes in het rooster is een functie van het aantal deeltjes. Worden er 1000 deeltjes of minder gebruikt in de simulatie dan

heeft het rooster 15x15 vakjes. Worden er tussen de 1000 en 3000 deeltjes gebruikt dan heeft het rooster 20x20 vakjes. Worden er meer dan 3000 deeltjes gebruikt dan heeft het rooster 25x25 vakjes.

De gekozen getallen voor het aantal telvakjes zijn het resultaat van enkele testruns gedaan met het MARS model, en van theoretisch onderzoek, gedaan bij het Waterloopkundig Laboratorium. Uit dit onderzoek bleek dat voor een gaussisch verdeelde vlek de optimale vakbreedte schaalte met de inverse van de vierde machtswortel van het aantal deeltjes.

Daar het patroon van sediment op de bodem in het algemeen erg onregelmatig is, is het niet zinvol om de grootte van het telraam nog nauwkeuriger te specificeren.

Opgemerkt dient te worden dat het gebruik van WAQUA/GENO-vakken als telvakken tot astronomische waarden leidt van de erodeerbare mass M_0 . Dit komt doordat deze vakken (oppervlakte is 64 km²) veel te groot zijn in vergelijking met de afmetingen van de meeste calamiteuze lozingen van sediment. WAQUA/GENO vakken kunnen daarom niet als telvakken gebruikt worden.

3.6 Adsorptie/desorptie

Niet in MARS 3.00 ingebouwd.

3.7 Afbraak

In MARS 3.00 zijn eerste orde afbraakprocessen ingebouwd, dat wil zeggen dat de massa van een stof op tijdstip t voorgeschreven wordt door

$$M(t) = M_0 e^{-kt}$$

Vaak wordt de afbraak beschreven door een halfwaarde tijd T_{50} . Tussen T_{50} en k geldt het verband

$$k = \ln 2 / T_{50}$$

De op elk tijdstip in het systeem aanwezige massa wordt over het aantal deeltjes verdeeld.

Parameters: k , M_0

In de huidige situatie hebben de parameters de volgende waarden:

$k = \begin{cases} 0 & \text{voor olie;} \\ & \text{wordt voor andere stoffen door de gebruiker opgegeven} \end{cases}$

$M_0 =$ wordt door de gebruiker opgegeven

4. Transport

Onder transport wordt de verplaatsing binnen een compartiment verstaan.

In MARS 3.00 worden vier soorten transport onderscheiden: advectie, verspreiding (autonoom transport), uitzakken en dispersie (passief transport).

4.1 Advectie

Elk deeltje in de drijfslaag of in de waterfase wordt door advectie in horizontale richting per tijdstap verplaatst over een vector $\Delta \underline{s}$ gegeven door

$$\Delta \underline{s} = \underline{u}^{3D} \cdot \Delta t$$

4.2 Autonome verspreiding

Het uitbreiden van een drijvende vlek wordt verspreiding genoemd. Wij maken onderscheid tussen olie en andere chemicaliën.

4.2.1 Olie

De in de drijfslaag aanwezige oliedeeltjes worden verplaatst volgens de vector

$$\Delta \underline{s} = \begin{pmatrix} \Delta s \cos \varphi r \\ \Delta s \sin \varphi r \end{pmatrix}$$

waarin φr "random" getrokken wordt uit een uniforme verdeling op het interval $[0, 2\pi)$ en

$$\Delta s = \sqrt{R \frac{dR}{dt} \Delta t}$$

R en $\frac{dR}{dt}$ worden numeriek met de 4^e orde Runge-Kutta methode opgelost uit de gewone differentiaalvergelijking

$$\frac{d^3 R}{dt^3} - \frac{3Vg(\rho_w - \rho_e)}{2\rho_w \pi R^3} - \frac{3\pi\sigma R}{\rho_e V} - \frac{1}{R} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 + \frac{2.175 \cdot 10^{-3} \rho_w \sqrt{v_w}}{\varphi_e V}$$

$$R^{3/2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^{3/2} + \frac{1.5 \cdot 10^{-6} v_e}{R^2} \frac{dR}{dt} = 0$$

Als $R > \sqrt{\frac{10^5 V_o^{3/4}}{\pi}}$ is, wordt R gelijk genomen aan

$$\sqrt{\frac{10^5 V_o^{3/4}}{\pi}} \text{ en } \frac{dR}{dt} \text{ wordt gelijk aan } 0 \text{ genomen.}$$

Kuipers (1988) en Bommelé (1988) geven een beschrijving en afleiding van de differentiaalvergelijking. Bommelé (1988) beschrijft ook de procedure om $V(t)$, $\rho_e(t)$ en $v_e(t)$ te berekenen.

Parameters: g , ρ_w , $\rho_e(o)$, σ , v_w , $v_e(o)$, V_o

In de huidige situatie hebben de parameters de volgende waarden:

g	=	9.81 m/s ²
ρ_w	=	1028 kg/m ³
$\rho_e(o)$	=	} wordt voor betreffende oliesoort uit een database opgehaald; de oliesoort wordt door de gebruiker opgegeven
$v_e(o)$	=	
σ	=	2.0 . 10 ⁻² N/m
v_w	=	1.3 . 10 ⁻⁶ m ² /s
V_o	=	wordt door de gebruiker opgegeven.

4.2.2. Andere chemicaliën

Niet in MARS 3.00 ingebouwd.

4.3 Uitzakken

Gedispergeerde deeltjes kunnen uitzakken. De verticale verplaatsing berekenen wij met de formule

$$\Delta z = - v_s \Delta t$$

Parameters: v_s

v_s wordt voor de betreffende stof uit een database opgehaald.

De valsnelheid kan eventueel met de formulering van Stokes-Einstein berekend worden. De valsnelheid is dan een functie van de soortelijke massa en van de grootte van de gedispergeerde deeltjes.

De nieuwe verticale positie van een deeltje volgt nu uit

$$\mu^{\text{nieuw}} = \mu^{\text{oud}} + \Delta z/h'.$$

Als voor een deeltje geldt dan $\mu^{\text{nieuw}} < 0$, dan ondergaat dat deeltje geen transport, maar een proces, nl. het verdwijnt uit de gedispergeerde fase en komt op de waterbodem terecht (sedimentatie).

4.4 Dispersie

Alle kleinschalige wervels die niet door middel van de aangeleverde snelheidsvelden worden weergegeven, worden met behulp van dispersie gemodelleerd. In MARS 2.01 wordt de dispersie gemodelleerd volgens het "scaled random walk" concept (Van Dam, 1985; Maier-Reimer). Wij maken onderscheid tussen horizontale en verticale dispersie. Alleen opgeloste en gedispergeerde deeltjes ondergaan een dispersieve verplaatsing.

4.4.1 Horizontale dispersie

De verplaatsingsvector ten gevolge van horizontale dispersie heeft de vorm

$$\underline{\Delta s} = \begin{pmatrix} \Delta s_r \cos \phi_r \\ \Delta s_r \sin \phi_r \end{pmatrix},$$

waarin

$$\Delta s_r = 2 \sqrt{K_1 \Delta t} \left(t_1^{-\alpha_{op}} + \tau_\lambda^{-\alpha_{op}} \right)^{-1/p}$$

en ϕ "random" getrokken wordt uit een uniforme verdeling op het interval $[0, 2\pi]$.

Parameters: K_1 , τ_λ , α_0 , p

In de huidige situatie hebben de parameters de volgende waarden:

$$K_1 = 1.815 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s} \text{ (2D)}, K_1 = 0.8 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s} \text{ (3D)}$$

$$\tau_\lambda = 1.8 \cdot 10^6$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{2}$$

$$p = 4$$

N.B. In principe hebben de parameters K_1 , τ_λ , α_0 en p voor 2D en 3D toepassingen verschillende waarden.

4.4.2 Verticale dispersie

De verticale dispersie wordt uitgedrukt in een verticale uitwisselingstijd T_z . De relatie met de verticale dispersie coëfficiënt D_z is:

$$D_z = \frac{1}{2} \frac{H^2}{T_z}$$

De verticale verplaatsing (voor een relatieve coördinaat μ tussen 0 en 1) ten gevolge van de verticale dispersie heeft de vorm van:

$$\Delta\mu = \Delta\mu_R \sqrt{\frac{3 \Delta t}{T_z}},$$

waarin $\Delta\mu_R$ "random" getrokken wordt uit een uniforme verdeling op het interval $(-1, +1)$. Met de berekende $\Delta\mu$ wordt de nieuwe verticale positie μ bepaald volgens:

$$\mu^{\text{nieuw}} = \mu^{\text{oud}} + \Delta\mu$$

Mocht μ^{nieuw} buiten $[0,1]$ liggen, dan wordt het deeltje "gereflecteerd" nl. als

$$| \mu^{\text{nieuw}} - 1 | > 1,$$

dan wordt de uiteindelijke positie van het "gereflecteerde" deeltje gelijk aan

$$(1 - \mu^{\text{nieuw}}) + \text{sign } \mu^{\text{nieuw}}$$

Deze reflectieprocedure wordt niet toegepast voor oliedeeltjes als de nieuwe $\mu > 1$ is. In dat geval ondergaat het deeltje geen transport, maar een proces, nl. van de gedispergeerde fase naar de drijfslaag.

T_z is vast gekozen (benadering: zou eigenlijk op droogvallende platen veel lager moeten zijn als in diep water). T_z kan variëren van een 1/2 uur tot 3 dagen op de Noordzee, afhankelijk van de mate van stratificatie. Gezien de grote spreiding van T_z is deze parameter in MARS3.00 als invoerparameter gedefinieerd. Als default is een waarde van 3 uur gekozen.

Voor kleine waarden van T_z is de gekozen tijdstap in MARS (10 minuten) mogelijk wat aan de grote kant. Daar echter een kleine T_z betekent dat er een relatief goede doormenging plaatsvindt, heeft een te grove keuze van de tijdstap slechts effect kort na de lozing, wanneer de stof nog niet over de waterkolom verdeeld is. Daar de weergave van dit effect niet van groot belang is voor de gebruikers van MARS, is verder afgezien van een variabele tijdstap.

Opmerking: voor specialisten is het aan te bevelen ook de q-factor van het 'van Veen profiel' voor de beschrijving van het verticale snelheidsprofiel voor 3 dimensionale berekeningen naar inzicht mee te variëren (zie ook &2.4.1). De waarde van q varieert namelijk met de mate van stratificatie in een bepaald gebied (deze factor kan zonodig aangepast worden in de GENO.GEO file, waarvan een beschrijving in Appendix G van de gebruikershandleiding (7) te vinden is).

4.4.3 Tijdstapgrootte

De tijdstap Δt bepaalt enerzijds de rekentijd die voor de simulatie nodig is, anderzijds heeft de grootte van Δt invloed op de nauwkeurigheid van de berekende resultaten.

In deze subsectie zullen wij nog enkele heuristische voorwaarden voor Δt afleiden, opdat de resultaten met een redelijke nauwkeurigheid berekend worden.

4.4.3.1 Advectie

De verplaatsing door advectie in een tijdstap Δt moet veel kleiner zijn dan de afmetingen van rekenelement van het hydrodynamische grid

$$|\Delta \underline{s}| \ll \Delta$$

ofwel

$$\Delta t \ll \Delta / \left| \frac{3D}{\underline{u}} \right|$$

4.4.3.2 Verspreiding

De verplaatsing van de oliedeeltjes in de drijf laag door verspreiding in een tijdstap Δt moet veel kleiner zijn dan de straal van de drijvende olie-vlek.

$$|\Delta \underline{s}| \ll R,$$

ofwel

$$\Delta t \ll \frac{1}{2} R / \frac{dR}{dt}$$

4.4.3.3 Uitzakken

De verplaatsing door uitzakken in een tijdstap Δt moet veel kleiner zijn dan de actuele waterdiepte:

$$|\Delta z| \ll h'$$

ofwel

$$\Delta t \ll \frac{h'}{v_s}$$

4.4.3.4 Horizontale dispersie

Voor horizontale dispersie geldt hetzelfde als voor advectie;

$$\Delta s_r \ll \Delta$$

ofwel

$$\Delta t \ll \frac{\Delta^2}{4K_1} (\tau_1^{-\alpha_{op}} + \tau_\lambda^{-\alpha_{op}}) 2/P$$

4.4.3.5 Verticale dispersie

Voor de verticale dispersie geldt hetzelfde als voor uitzakken:

$$| \Delta\mu | \ll 1$$

ofwel

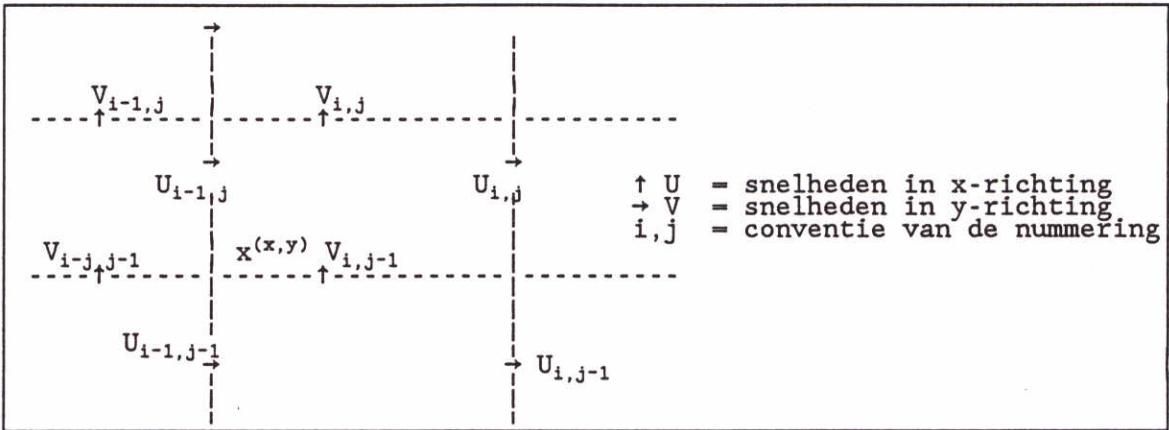
$$\Delta t \ll T_z / [3 | \Delta\mu_r |^2]$$

Een "veilige" grens voor Δt is

$$\Delta t \ll \frac{1}{3} T_z$$

4.4.4. Grootte van de telhokjes

In het model MARS worden de concentraties berekend door telling van de deeltjes op een rechthoekige rooster. De afmetingen van de telvakken is afhankelijk van de door de gebruiker gekozen afbeeldingsmaatstaf, en bedraagt Δ/f_{zoom} meter. Bij zowel te kleine, als te grote telvakken, worden de concentraties verkeerd berekend. Het is daarom noodzakelijk een goede zoomfactor te kiezen. In appendix F van de gebruikershandleiding worden een paar vuistregels voor de grootte van f_{zoom} gegeven.



Figuur 1: Schematisatie van het grid met de gebruikte notatie

Referenties

1. Bommel , M.
Documentation on the Transspill simulation model"
Rijkswaterstaat, Directie Noordzee, 1988.
2. Dam, G.C. van
Deeltjesmodellen (tweedimensionaal-horizontaal)
Rijkswaterstaat, Fysische Afdeling, nota FA 8507, 1985
3. Kuipers, H.D.
Processen which influence the motions and characteristics of oil at
sea. Delft/Rijswijk, Technische Universiteit Delft/Rijkswaterstaat,
Directie Noordzee, 1980.
4. Maier-Reimer, E.
Hydrodynamisch-numerische Untersuchungen zu horizontalen
Ausbreitungsvorgngen in der Nordsee.
Dissertaitte Universitt Hamburg/Mitteilungen Inst. fr Meereskunde
der Universitt Hamburg, XXXI
5. NETLIB library, subroutine VRFFTF (Vectorized Real Fast Fourier
Transform Forward, version of 5-9-1990), authors: Sweet R.A., and
Lindgren, L.L., National Bureau of Standards, Boulder, USA
6. P.N. Swarztrauber, Vectorizing the FFTs, in Parallel Computations,
(G. Rodrigue, ed.), Academic Press, 1982, pp. 51-83.
7. Gebruikershandleiding MARS3.00, DELFT HYDRAULICS, April 1994
8. Aanpassingen MARS2.03, (presentatie van MARS3.00), DELFT HYDRAULICS,
April 1994



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
telex 42290 hylvo-nl

