

Vervuilingsrisico's in kustgebieden

M.C.A. de Kever

Bachelorproject Verslag

M.C.A. de Kever

Vervuilingsrisico's in kustgebieden

Verslag ten behoeve van het
Delft Institute for Applied Mathematics
als onderdeel ter verkrijging

van de graad van

BACHELOR OF SCIENCE
in
TECHNISCHE WISKUNDE

Technische Universiteit Delft
Faculteit Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica
Delft Institute of Applied Mathematics

Technische Wiskunde
Mathematische Fysica
Delft, Nederland
Augustus 2008

Contact: M.C.A.deKever@student.tudelft.nl

Begeleider: Prof.dr.ir. A.W. Heemink
Commissielid: Dr. P. Wilders
Commissielid: Dr.ir. M.B. van Gijzen
Commissielid: Dr. J.G. Spandaw

Copyright © 2008 door Margit de Kever. Alle rechten voorbehouden.

Voorwoord

Dit rapport is gemaakt in het kader van de Bachelor Technische Wiskunde aan de Technische Universiteit Delft. Het bevat het verslag van het afsluitende Bachelorproject. Het project is uitgevoerd bij de afdeling Mathematische Fysica.

Voor een beknopt overzicht van de inhoud van dit verslag wordt u verwezen naar de samenvatting.

Dank is verschuldigd aan prof.dr.ir. A.W. Heemink, afdeling Toegepaste Wiskunde, Mathematische Fysica, TU Delft, voor begeleiding, commentaar en constructieve aanwijzingen. Dr. P. Wilders, afdeling Toegepaste Wiskunde, Mathematische Fysica, TU Delft, voor specifieke begeleiding van het SIMONA gedeelte. Julius H. Sumihar, afdeling Toegepaste Wiskunde, Mathematische Fysica, TU Delft, voor het beantwoorden van al mijn vragen. En Peter van de Plas, voor de eerste inleiding in SIMONA en hulp met de SIMONA-code.

Samenvatting

In dit project wordt vervuilingstransport in kustwateren door diffusie en advection gemodelleerd. Het is mogelijk dit te doen met behulp van numerieke modellen die zijn gebaseerd op gediscretiseerde partiële differentiaalvergelijkingen. Maar in dit project is gekozen voor een deeltjesmodel. Dit deeltjesmodel is makkelijk en snel te implementeren. In het model hoeft bijvoorbeeld geen rekening gehouden te worden met negatieve concentraties, problemen met massabehoud en steile concentratie gradiënten, wat wel het geval is bij de numerieke methoden.

Er is eerst onderzoek gedaan naar de basiskennis die bestaat uit deeltjesmodellen, stochastische differentiaalvergelijkingen, de Fokker-Planck vergelijking, numerieke methoden en simuleren.

Vervolgens wordt het model opgesteld voor het deeltjes-transport, dat bestaat uit vier stappen.

1. Het advection-diffusie model dat de beweging beschrijft van deeltjes in een vloeistof, volgens:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (0.0.1)$$

2. Stochastische differentiaalvergelijkingen die dezelfde beweging van de deeltjes beschrijven, dankzij de Fokker-Planck vergelijking.
3. Het gediscretiseerde model met behulp van Euler volgens:

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t + \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\beta_t \quad (0.0.2)$$

4. Dit voorwaartse model kunnen we herschrijven als een achterwaarts model door de tijd en de snelheid om te draaien, dankzij de Kolmogorov-backward vergelijking. Hierdoor moeten we de resultaten interpreteren als kansen.

$$\frac{\partial C}{\partial t} - u \frac{\partial C}{\partial x} - v \frac{\partial C}{\partial y} - w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (0.0.3)$$

met

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t - \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\beta_t \quad (0.0.4)$$

Vergeet niet dat we terug in de tijd rekenen!

De implementatie wordt besproken en het gebruik van SIMONA. Tenslotte wordt het model toegepast op een testcase. Hierbij worden resultaten gepresenteerd voor drie verschillende kritieke locaties.

In twee dimensies is al vaak gekeken naar de verspreiding van deeltjes. Hierbij werd vaak gestuit op problemen. Het blijkt moeilijk om rekening te houden met variaties in diepte en waterhoogte. In dit project is gekozen voor een drie dimensionale aanpak om te kijken of hier geen onvoorziene problemen ontstaan. Dit is niet gebeurd, dus alhoewel er met een dimensie meer moet worden gewerkt, blijkt dit toch makkelijker te zijn dan met twee dimensies werken.

Inhoudsopgave

1	Inleiding	1
1.1	Projectomschrijving	2
1.1.1	Korte beschrijving	2
1.1.2	Doelstellingen	2
1.1.3	Deelvragen	2
1.2	Motivatie	2
1.2.1	Belang	2
1.2.2	Nederland, waterland	3
1.2.3	Modelleren	4
1.3	Risico analyse	4
2	Basiskennis	5
2.1	Deeltjes-modellen	5
2.1.1	Een-deeltjes model	5
2.1.2	Twee-deeltjes model	5
2.1.3	Forward en Reverse-time modellen	6
2.1.4	Numerieke methoden voor het oplossen van het diffusieprobleem	6
2.1.5	Reflectie deeltjes-modellen	7
2.1.6	Point-spread functions en kernel estimators	8
2.1.7	Variatie reductie	9
2.2	Stochastische differentiaal vergelijkingen	9
2.2.1	Colored noise	11
2.3	De Fokker-Planck vergelijking	12
2.4	Numerieke methoden voor het oplossen van de stochastische differentiaal- vergelijkingen	12
2.4.1	Expliciet Euler schema	12
2.4.2	Impliciet Euler schema	13
2.4.3	Milstein schema	13
2.4.4	Heun schema	13
2.4.5	Runge-Kutta schema	14
2.4.6	Verskil horizontale en verticale spreiding	14
2.5	Simulatie	14
3	Model	16
3.1	Inleiding	16
3.2	De Diffusievergelijking	17

3.2.1	Eén-dimensionaal	17
3.2.2	Vectornotatie	18
3.2.3	Een oplossing	19
3.3	De Advectie-Diffusievergelijking	20
3.4	Stochastische Differentiaal vergelijkingen	21
3.5	Deeltjesmodel	22
3.6	Achterwaarts	22
3.7	Samenvatting	24
4	SIMONA	26
4.1	Rijkswaterstaat	26
4.2	SIMONA	26
4.2.1	Doelen SIMONA	27
4.3	Achtergrond	27
4.4	TRIWAQ	27
4.5	Toepassingen	28
5	Onderzoek	29
5.1	Eenvoudig model	29
5.1.1	Model voorwaarts	29
5.1.2	Model Achterwaarts	30
5.2	Testcase	30
5.2.1	Snelheden	31
5.2.2	Het model voorwaarts	31
5.2.3	Het model achterwaarts	31
5.2.4	Genereren resultaten	32
6	Resultaten	33
6.1	Eenvoudig model	33
6.2	Testcase	34
6.3	Locatie: 450,80	36
6.3.1	3d Plots en aanzichten	36
6.3.2	3d Plots en aanzichten - vervolg	37
6.3.3	Contourplots	38
6.3.4	Contourplots - vervolg	39
6.3.5	Overige resultaten	40
6.3.6	Overige resultaten- vervolg	41
6.4	Locatie: 450,30	42
6.4.1	3d Plots en aanzichten	42
6.4.2	3d Plots en aanzichten - vervolg	43
6.4.3	Contourplots	44
6.4.4	Contourplots - vervolg	45
6.4.5	Overige resultaten	46
6.4.6	Overige resultaten- vervolg	47
6.5	Locatie: 400,80	48
6.5.1	3d Plots en aanzichten	48
6.5.2	3d Plots en aanzichten - vervolg	49

6.5.3	Contourplots	50
6.5.4	Contourplots - vervolg	51
6.5.5	Overige resultaten	52
6.5.6	Overige resultaten- vervolg	53
6.6	Vergelijken resultaten	54
6.7	Risicomap	54
7	Conclusie	55
8	Reflectie	56
9	Bijlagen	58
9.1	Artikelen Greenpeace	58
9.1.1	De grootste olierampen in de geschiedenis	58
9.1.2	Transport van Olie	60
9.1.3	Vervuiling Oceanen	61
9.2	Artikelen vervuiling binnenland	63
9.2.1	Oude vervuiling Rijn blijkt 'tijdbom'	63
9.2.2	Vaten met xtc-afval in sloot gegooid	64
9.2.3	Vervuiling in Hollandsche IJssel ontdekt	64
9.3	Artikelen vervuiling buitenland	65
9.3.1	Milieuramp dreigt in Zwarte Zee	65
9.3.2	Olieramp Rusland breidt zich uit	65
9.3.3	Zuid-Korea kampt met olieramp	66
9.3.4	Eerste dode vogels door olieramp Zuid-Korea	67
9.4	Code eenvoudig model achterwaarts	68
9.5	Code Genereren gegevens	69
9.6	Code Testcase Achterwaarts	70
9.7	Code Resultaten	73
9.8	Code Filmpje	74

Hoofdstuk 1

Inleiding

Als er een milieuramp op zee plaatsvindt is het van belang te kunnen voorspellen waar de vervuiling heen gaat. Dat kan met de bekende voorwaartse diffusie modellen. Men is echter vaak vooral geïnteresseerd in het effect in enkele kwetsbare locaties (stranden, natuurgebieden). Dit effect is vanzelfsprekend erg afhankelijk van de locatie van de ramp. Bij sommige locaties zal de vervuiling nooit in het kwetsbare gebied aankomen, bij andere locaties juist wel. Om dit te bestuderen kan handig gebruik worden gemaakt van reverse-time diffusie modellen. Met deze modellen kan worden berekend waar de vervuiling vandaan gekomen is, gegeven dat het in een bepaalde kwetsbare locatie is aangekomen. Op deze wijze kan een kaart van de kustwateren gemaakt worden waarop voor iedere ramplocatie is aangegeven wat het risico is dat de ramp gevolgen heeft voor een gegeven kwetsbaar gebied.

In dit rapport staan de resultaten van het onderzoek naar bovengenoemde. Met behulp van een reverse-time diffusie model, is onderzoek gedaan naar risico's op vervuiling van ramplocaties in kustgebieden. Het onderzoek bestaat uit twee delen.

Het eerste deel is een literatuurstudie waarin onderzoek is gedaan naar de advection-diffusievergelijking en onderzoek naar reverse-time diffusiemodellen. Het reverse-time diffusiemodel is gebaseerd op de achterwaartse vergelijking van Kolmogorov. De bronnen van het onderzoek zijn te vinden in de bibliografie aan het eind van dit rapport. Ook is er in de literatuurstudie onderzoek gedaan naar een eerste opzet voor het implementeren van het model. Tenslotte is een overzicht gemaakt van de basiskennis.

Het tweede deel is de daadwerkelijke implementatie van het model, waarin het uiteindelijke doel is, het maken van een kaart waarop de risico's worden aangegeven. Het model wordt gemaakt in stappen. Stap 1 is een eenvoudig voorwaarts model. Stap 2 is een achterwaarts model. In stap 3 wordt het model toegepast op een testcase.

Het verslag bestaat uit de volgende onderdelen: allereerst een duidelijke projectomschrijving, hierna wordt het model opgesteld. Dit zijn de resultaten van het literatuuronderzoek. In de kern van het verslag zal u de resultaten en toegepaste methoden van de implementaties aantreffen. Tenslotte zal in de conclusie een toelichting op de resultaten staan. En in de reflectie kunt u een terugblik op het project verwachten. In de bijlagen vindt u de gebruikte code en een aantal relevante artikelen.

Voor de implementatie is gebruik gemaakt van het programma Matlab.

1.1 Projectomschrijving

1.1.1 Korte beschrijving

In dit project wordt vervuilingstransport in kustwateren door diffusie en advectie gemodelleerd. Het is mogelijk dit te doen met behulp van numerieke modellen die zijn gebaseerd op gediscrètiseerde partiële differentiaalvergelijkingen. Maar in dit project is gekozen voor een deeltjesmodel. Dit model is makkelijker te implementeren en vermijdt problemen die bij numerieke modellen vaak voorkomen. Deze problemen komen later nog aan bod. Dit soort deeltjesmodellen is al vaker gebruikt voor het voorspellen van vervuiling, bijvoorbeeld in [4]. Deze modellen zijn twee dimensionaal. Deze modellen stuiten vaak op problemen aangezien, hoewel er in twee dimensies wordt gerekend, de diepte wel moet worden meegenomen. Hiervoor worden aan de deeltjes verschillende gewichten gehangen. Dit brengt veel moeilijkheden met zich mee. Het unieke aan dit project is, dat het model in 3d wordt opgezet. Het is de bedoeling om te kijken of dit model de problemen kan vermijden van de twee dimensionale modellen en of dit opweegt tegen de extra berekeningen en mogelijke extra berekentijd.

1.1.2 Doelstellingen

Doelstelling 1: Opstellen van het model.

Doelstelling 2: Implementatie eenvoudig model voorwaarts.

Doelstelling 3: Implementatie eenvoudig model achterwaarts.

Doelstelling 4: Implementatie model op testcase achterwaarts.

Doelstelling 5: Samenstellen kaart risico ramplocaties.

1.1.3 Deelvragen

1. Wat is het advectie-diffusie model?
2. Hoe werkt het deeltjesmodel?
3. Hoe werken de concentraties/kansverdelingen wanneer we achterwaarts rekenen?

1.2 Motivatie

1.2.1 Belang

Een kustgebied heeft veel functies, zoals huisvesting, visvangst, landbouw, watervoorziening, navigatie, natuur en recreatie. Mensen vinden er voedsel, water en vruchtbaar land. Economisch gezien is een kustgebied ook een strategische locatie. Het is dan ook niet gek dat bijna 50 procent van de wereldbevolking woont in kustgebieden, bijvoorbeeld in megapolen als Tokio en New York. Het is duidelijk dat dit ook veel problemen met zich meebrengt. Er ontstaan conflicterende belangen. Met een alsmaar groter wordende wereldbevolking zal het gevaar voor het behoud van kustgebieden alleen maar vergroot worden.

Wegens de kwetsbaarheid van het ecologisch systeem in kustgebieden, kan een kleine verandering catastrofale gevolgen hebben. Één van de bekendste rampen is de olietanker Exxon Valdez die vast liep voor de kust van Alaska op 24 maart 1989. Hierbij liep minstens 40 miljoen liter de zee in. Hierbij werd 2080 km kustlijn vervuild. Duizenden dieren stierven onmiddellijk. Naar schatting waren dit onder andere 250.000 zeevogels, 2800 zeotters, 300 zeehonden, 22 orca's en miljoenen vissen. Verder stierven er dieren aan het eten van vervuild voedsel of het woelen in vervuilde bodem. De visvangst daalde van 270 vissersschepen naar 80. De beschadigde mosselbanken hebben zo'n 30 jaar nodig voor herstel. In bijlage (9.1.1) staat een lijst met de meest bekende olierampen uit de geschiedenis.



Figuur 1.1: Olieramp

Naast rampen met schepen, die naast olie ook bijvoorbeeld giftige stoffen kunnen lekken, is ook de vervuiling van de industrie een factor die bijdraagt aan de vervuiling van de zee. Bijvoorbeeld de industrie die aan de Rijn en de Maas ligt, vervuult deze rivieren en deze vervuiling komt vervolgens via de Nieuwe Waterweg terecht in de Noordzee. Andere oorzaken zijn chemisch afval, chemische bijproducten, riooluitvoer, pesticiden, die via het grondwater in de zee komen, enzovoorts. Er wordt wel al gewerkt aan het terugdringen van deze vervuiling. Een van de maatregelen is het bouwen van schepen op een bepaalde manier, waardoor de kans op lekken zo veel mogelijk verkleind wordt. In bijlage (9.1.3) staat een uitgebreid artikel over de vervuiling van oceanen.

Tegenwoordig is bij het management van het kustgebied, wat te doen bij ongelukken, een belangrijke prioriteit. Hiervoor is het belangrijk te weten, hoe het vervuilingstransport plaats vindt in de zee. Het is bijvoorbeeld belangrijk te weten waarheen vervuiling verspreidt, hoe snel het zich verspreidt en wat de maximum concentratie is.

Eind jaren tachtig is er voor de Noordzee een groep onderzoekers samengebracht, die het gedrag van de zee bestuderen. Daarnaast zijn honderden instituten en onderzoeksgroepen bezig met het simuleren van vervuilingstransport in deze zee. De Noordzee is erg kwetsbaar. Het kustgebied van Nederland is daar een belangrijk deel van. Het is het dichtstbevolkte deel van Europa. Een specifiek deel hiervan is de Waddenzee, die een uniek ecosysteem heeft. Veel van de hiervoor genoemde vervuiling uit de Nieuwe Waterweg komt hier mogelijk terecht.

1.2.2 Nederland, waterland

In Nederland is management over water extra belangrijk. De helft van Nederland ligt onder het zeeniveau. Dit is te danken aan de lange Nederlandse geschiedenis in hydrolica, waarin

al veel is bereikt. Het winnen van land door dijken te bouwen, stamt al uit de tijd van de Romeinen. Toch zijn er veel ongelukken gebeurd. In 1953 zorgde een wilde storm voor grote overstromingen in het zuid-westen van Nederland, dit was de Watersnoodramp. Hieruit ontstond de vraag naar betere bescherming en de Delta-werken waren geboren. Het bouwen van de Deltawerken is een grote stimulans geweest voor het ontwikkelen van methoden voor het modelleren van hydrologische toepassingen. Dit komt later nog terug.

1.2.3 Modelleren

Bij het onderzoek naar vervuilingstransport worden vaak modellen opgesteld. Deze modellen representeren een vereenvoudigde weergave van de werkelijkheid. Veel factoren worden namelijk buiten beschouwing gelaten om een eenvoudig, beheersbaar model te verkrijgen. Er moet een juiste middenweg worden gevonden tussen een juiste weergave en een te verwerken grootte van het model. Per factor moet eigenlijk worden bekeken hoe significant deze is voor de uitkomst. Het verbeteren van een model berust volgens [4] op vier punten.

- Vertrouwen op de vergrotende kracht van computerhardware
- Het vergroten van rekenefficiëntie, bijvoorbeeld door de grootte van het probleem te verkleinen
- Toepassen van nieuwe benaderingen en rekenmethoden
- Meer factoren meenemen in het model

1.3 Risico analyse

Een risico-analyse¹ is een techniek voor het uitvoeren van een analyse van een risico. De term verzekeringswiskunde wordt vaak gebruikt als synoniem. Bij een risicoanalyse worden bedreigingen in kaart gebracht. Per bedreiging wordt de kans van het optreden ervan bepaald en wordt vervolgens beoordeeld wat de schade is, die op zou kunnen treden als een bedreiging daadwerkelijk optreedt. De bedoeling van een risicoanalyse is, dat er na de analyse wordt vastgesteld op welke wijze de risico's beheerst kunnen worden, of teruggebracht tot een aanvaardbaar niveau.

In het kader van dit project houdt risico-analyse het volgende in. Voor een bepaalde kritieke locatie kan een hoge concentratie vervuiling gevaarlijk of fataal zijn voor het leven van bepaalde soorten. Deze ecologische rampen moeten voorkomen worden. Hiervoor moet worden bepaald welke gebieden in de zee mogelijk gevaarlijk zijn voor de kritieke locatie en welke veilig zijn. Er wordt een risico kaart gemaakt voor de kritieke locatie. Hierop staat de concentratie van de vervuiling in het gebied voor elke locatie $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ waar de bron van de vervuiling zou kunnen zijn. Uit deze risico map kan dan meteen worden bekeken welke locatie van de bron van vervuiling gevaarlijk is en waar deze veilig is.

¹Bron: www.wikipedia.nl

Hoofdstuk 2

Basiskennis

2.1 Deeltjes-modellen

2.1.1 Een-deeltjes model

In dit project wordt gewerkt met een één deeltjesmodel. Dit model komt grotendeels neer op het voorspellen van gemiddeldes van verspreiding van een groot aantal deeltjes. De kenmerken van dit model zijn, dat deze deeltjes zich onafhankelijk van elkaar bewegen en dat er geen rekening wordt gehouden met correlaties. Er wordt vooral gekeken naar de afstand tussen de plaats van een afzonderlijk deeltje in de tijd en de plaats van release. Voordelen van dit model zijn, dat het makkelijk, snel en simpel te implementeren is. Maar een nadeel is, dat er zeker rekening gehouden moet worden met het feit dat een real-life situatie veel kan verschillen met een gemiddelde berekening (zie volgende paragraaf).

2.1.2 Twee-deeltjes model

Een ander deeltjes-model is het twee-deeltjes model. Dit model houdt wèl rekening met de correlatie van verschillende deeltjes. Hier gaat het om de afstand tussen één paar deeltjes. Hiermee kan de concentratie variantie worden bepaald. Dit is bijvoorbeeld belangrijk voor het bepalen van de maximum concentratie van de vervuiling. Bij het één-deeltjes model worden hoge en lage concentraties gemiddeld. Dit houdt in dat er een maximale concentratie voor kan komen die boven een kritieke waarde ligt, maar die wordt uitgedoofd door een lage concentratie. Dit houdt in de realiteit in, dat er een hele soort kan worden uitgemeord door die ene piek, terwijl dat niet in het model was berekend. Want zodra de concentratie boven de kritieke waarde uitkomt is het leed al geschied, mocht er vervolgens heel weinig concentratie zijn op die plek, is het al te laat. In het model wordt dit mogelijk niet goed weergegeven. Het twee-deeltjesmodel houdt hier wel rekening mee. Ook wordt in het twee-deeltjes model rekening gehouden met moleculaire diffusie. In het één-deeltjes model kan deze diffusie worden verwaarloosd vergeleken met de turbulente diffusie.

Naast het twee-deeltjes model bestaan er ook multiple-particle modellen. Maar vaak kosten deze modellen te veel tijd om door te rekenen en in de praktijk is het meestal voldoende om gemiddeldes en varianties te weten. Één- en twee-deeltjes modellen zijn dus voldoende.

Wat voor de validatie van beide modellen belangrijk is, zijn de juiste parameters. Deze parameters worden bepaald aan de hand van metingen. Voor het eerste model worden

metingen gedaan met behulp van drifters. Deze drifters volgen de bewegingen van de vloeistof aan de oppervlakte. De drifters kunnen vervolgens worden gemonitord met behulp van satelieten. Bij het tweede model wordt gebruik gemaakt van tracers, dit zijn fluorerende vloeistoffen of rhodamine B. Deze stoffen worden bijvoorbeeld gebruikt voor het voorspellen van de horizontale spreiding van een substantie.

2.1.3 Forward en Reverse-time modellen

Naast de verdeling tussen één- en twee-deeltjes modellen, wordt in dit project ook onderscheid gemaakt in een voorwaarts en een achterwaarts model. Met het voorwaartse model wordt vanaf de bron gekeken waar de vervuiling over het gehele domein verspreid is. In het achterwaartse model is men vooral geïnteresseerd in de concentratie op een bepaald punt. Hiervoor zijn veel minder deeltjes nodig in de simulatie. In [4] wordt gesproken over een nog optimaler model. Dit wordt de forward reverse estimator genoemd. Deze schatter is een combinatie van het deeltjes voorwaarts sturen vanaf de bron en de reverse tracks van deeltjes uit het kritieke punt van interesse. Hierdoor wordt de berekeningstijd vergeleken met het originele voorwaartse model, met een orde verkleind. De parameter $t^* \in [t, T]$, dit is de tijd waar de voorwaartse en achterwaartse tracks elkaar tegen komen, wordt op twee manieren bepaald. Aan de ene kant is deze parameter optimaal waar de varianties van beide systemen gelijk aan elkaar zijn. Aan de andere kant moeten er wegings-coëfficiënten worden toegekend die dicht bij 1 liggen. Hierdoor moet t^* mogelijk dicht bij T gekozen worden.

2.1.4 Numerieke methoden voor het oplossen van het diffusieprobleem

Hoewel in dit project wordt gewerkt met een deeltjesmodel, is het in het verleden gebruikelijker geweest om numerieke methoden te gebruiken voor het oplossen van het advection-diffusieprobleem. De transport vergelijking wordt hier berekend op een vast ruimtelijk grid. Drie van deze methoden worden hier beknopt opgesomd.

1. **Eindige differentie methode** Deze methode is waarschijnlijk de oudste, meest populaire en conceptueel de makkelijkste van de methoden. De techniek is gebaseerd op benaderingen van de differentiaalvergelijkingen door algebraïsche vergelijkingen. De oplossing bestaat uit drie stappen. Allereerst wordt het probleemgebied verdeeld in rechthoeken met behulp van discrete punten. Vervolgens wordt de partiële differentiaalvergelijking benaderd door een Taylor expansie. Tenslotte wordt het lineaire systeem van vergelijkingen opgelost met behulp van de begincondities.
2. **Geïntegreerde eindige differentie methode** Deze methode is een extensie van de vorige methode. In plaats van rechthoeken worden hier onregelmatige polygonen gebruikt. Hoewel deze methode meer flexibiliteit toevoegt, is hij moeilijker op te lossen.
3. **Eindige elementen methode** Deze methode wordt ook veel gebruikt voor het oplossen van de vergelijking. In het kort is deze methode gebaseerd op het gebruik van gewogen residuen. Het verschil met de vorige methoden zit erin dat zij de vergelijking proberen te benaderen, terwijl deze methode de oplossing probeert te benaderen. De methode van eindige elementen is nauwkeuriger en flexibeler, maar is wel erg complex en vergt veel rekentijd en computergeheugen.

Het voordeel van deze numerieke methoden is dat ze een vast grid gebruiken en op zich makkelijk te implementeren zijn. Helaas hebben de methoden toch ook vele nadelen (die het deeltjesmodel niet heeft). Bij stijle concentratie gradiënten komen er problemen voor met numerieke dispersie, artificiële oscillaties en fouten in het massabehoud. Dit komt bijvoorbeeld voor bij advection-gedomineerde problemen, die vaak voorkomen. Ook wanneer de initiële concentratie wordt voorgesteld met de deltafunctie, bijvoorbeeld wanneer opeens vervuiling wordt gedumpt in de zee, ontstaan er fouten. Numerieke dispersie kan te groot worden en oscillaties leiden tot negatieve concentraties. Ook kan er verlies van massa optreden. Om dit alles tegen te gaan moet het grid verfijnd worden en moeten kleinere tijdstappen genomen worden. Dit gaat gepaard met teveel rekentijd en tekort aan geheugen.

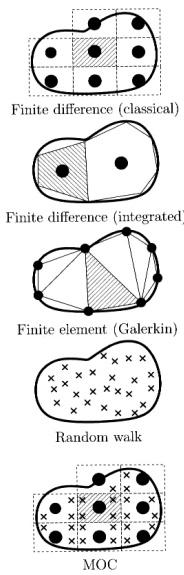
2.1.5 Reflectie deeltjes-modellen

Tenslotte zetten we de voor- en nadelen van deeltjesmodellen nog even op een rijtje:

<i>Voordelen</i>	<i>Nadelen</i>
<ul style="list-style-type: none"> ★ Simpel te implementeren ★ Parallel te berekenen dankzij onafhankelijkheid ★ Mogelijkheid steile concentratie gradiënten ★ Concentratie wordt niet negatief ★ Geen rare oscillaties ★ Massabehoud ★ Vrij van numerieke dispersie 	<ul style="list-style-type: none"> ★ Deeltjes representeren massa ★ Concentratie is onbekend ★ Veel deeltjes nodig

Deze voordelen gelden vooral in vergelijking met alternatieve numerieke methoden. Numerieke methoden kosten veel rekentijd en kunnen geen rare veranderingen of stijle initiële pieken aan, zoals in de vorige paragraaf is aangegeven. Het behoud van massa komt, omdat een deeltje dat massa voorstelt nooit het domein zal verlaten.

Het nadeel dat er veel deeltjes nodig zijn en dat dit dus veel rekentijd zou kosten, wordt steeds minder een issue tegenwoordig met snellere computers die steeds meer berekeningen aan kunnen in korte tijd. Dat de deeltjes alleen massa representeren is een nadeel aangezien je dan nog niets kan zeggen over concentraties of kansverdelingen, zonder verdere toevoegingen of berekeningen. Er kan alleen nog maar iets worden gezegd over de relatieve hoeveelheid deeltjes op één plek. Het probleem van onbekende concentratie aangezien we met massa werken is wel snel verholpen door gebruik van gemiddeldes of door gebruik van point-spread functies of kernel estimators, die later in dit hoofdstuk nog aan bod komen. In dit project zal er geen gebruik gemaakt worden van concentraties maar kansen.



N.B. In [4] wordt er ook nog gesproken van een combinatie van zowel een deeltjesmodel als een numerieke methode. Deze techniek bestaat uit gecombineerde Euleriaanse-Lagrangiaanse methoden, waarin het deeltjesmodel onder de Lagrangiaanse methoden valt en de bovengenoemde numerieke methoden onder de Euleriaanse modellen. Deze manier van benoemen komt van de manier waarop de oorsprong in een stelsel staat. Bij Euler staat deze oorsprong vast. In het model van Lagrange beweegt de oorsprong mee. Door het combineren van beide zienswijzen wordt er gebruik gemaakt van de voordelen van elk model. Een voorbeeld van een gecombineerde methode, is de methode van karakteristieken. Onder deze techniek vallen onder andere de MOC(method of characteristics), MMOC(modified method of characteristics) en HMOC(hybrid method of characteristics). Het komt erop neer, dat deeltjes met concentraties worden toegekend aan cellen. Vervolgens worden deze deeltjes voor- dan wel achterwaarts gestuurd en in de cel wordt dan de concentratie berekend aan de hand van de deeltjes in de cel.

2.1.6 Point-spread functions en kernel estimators

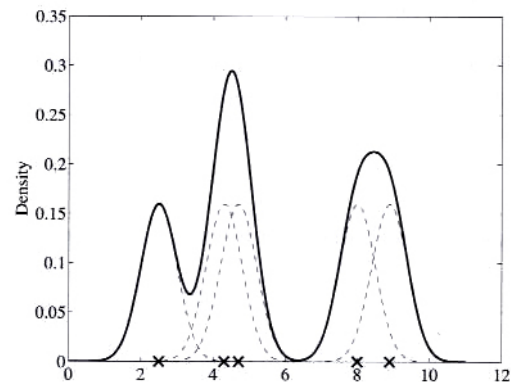
In plaats van elk deeltje een puntmassa mee te geven en zo de concentratie te bepalen, kan er per deeltje ook een gebiedje met massa worden meegegeven. Hierdoor wordt de massa veel geleidelijker verdeeld en zal de oplossing tot een beter resultaat leiden. Voor het beste resultaat moeten er twee vragen worden beantwoord. 'Wat is de beste vorm?' Hiervoor kan bijvoorbeeld in 2D gekozen worden uit parabolisch, driehoekig of Gaussisch. En voor de derde dimensie uit rond of ovaal. De tweede vraag is: 'Wat is de juiste bandbreedte?'. De formule voor kansdichtheid volgens de kernel estimator gaat als volgt:

$$\hat{p}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N\delta^d} \sum_{n=1}^N K\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{X}^{(n)}}{\lambda}\right) \quad (2.1.1)$$

Hierbij is K de kernel functie en λ de bandbreedte. Een kernel functie voldoet minstens aan de volgende regel:

$$\int K(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 1 \quad (2.1.2)$$

De naam kernel estimator en point-spread functie wordt door elkaar gebruikt, maar staat voor hetzelfde. De oorzaak hiervan ligt in de achtergrond van beide methoden, ze komen uit verschillende gebieden van de wiskunde.



Figuur 2.1: Kernel estimator gebaseerd op vijf observaties

2.1.7 Variantie reductie

Naast het vertrouwen op snellere computers met meer geheugen in de toekomst, kan ook variantie reductie worden toegepast. Dit kan worden gedaan met Monte Carlo methoden. In [5] worden twee methoden genoemd, importance sampling en control variates. In het kort houdt importance sampling in, dat de originele stochastische differentiaal vergelijking wordt vervangen door een andere, die hetzelfde gemiddelde heeft, maar een kleinere variantie. Control sampling houdt in, dat we aan het bestaande proces een extra proces toevoegen, dat er op lijkt en met hetzelfde gemiddelde. Door een combinatie van deze processen verkrijgt men ook variantie reductie.

2.2 Stochastische differentiaal vergelijkingen

In het model worden een drietal stochastische differentiaal vergelijkingen opgesteld. Deze vergelijkingen verdienen wat aandacht en uitleg. We volgen hierbij de denkwijze en begrippen uit [5].

Laten we eerst eens een gewone differentiaal vergelijking bekijken:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) \tag{2.2.1}$$

Deze vergelijking kan ook worden geschreven volgens:

$$dx = f(t, x)dt \tag{2.2.2}$$

of

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t f(s, x(s))ds \tag{2.2.3}$$

hierbij is $x(t) = x(t|x_0, t_0)$ een oplossing die voldoet aan de beginconditie $x(t_0) = x_0$. Om nu stochastische processen te onderzoeken moeten we eerst nog een begrip definiëren voor de limiet van een stochastische serie. We gebruiken l.i.m. dat staat voor limit in mean square sense. Deze limiet wordt gedefinieerd als volgt:

$$\text{l.i.m. } t \rightarrow \infty X_t = X \tag{2.2.4}$$

Dit houdt het volgende in:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E\{(X_t - X)^2\} = 0 \tag{2.2.5}$$

Er kan nu gekeken worden naar de stochastische differentiaalvergelijking met de Brownse beweging:

$$\begin{aligned} dX_t &= f(t, X_t)dt + g(t, X_t)d\beta_t \\ X_{t_0} &= X_0 \end{aligned} \tag{2.2.6}$$

De $d\beta_t$ is een random term. Hier wordt nader toegelicht waar deze term voor staat. We definiëren een random proces W als ‘white noise’ wanneer er geldt dat zijn gehele gemiddelde nul is en zijn covariantie voor de tijden s en t gelijk is aan de Dirac delta functie.

$$E\{W(t)\} = 0 \tag{2.2.7}$$

$$E\{W(s)W(t)\} = \delta(t - s) \tag{2.2.8}$$

De naam ‘white noise’ komt van het feit dat het proces een uniforme spectrale dichtheid heeft. ‘White noise’ bestaat eigenlijk niet in de fysieke betekenis, maar het is een mathematische idealisering. Brownse beweging is nergens differentieerbaar, aangezien ‘white noise’ overall discontinu is. De Fouriertransformatie van de covariantie is:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \delta(t) dt = 1 \tag{2.2.9}$$

met $i^2 = -1$. ‘White noise’ kan nu worden gezien als een hypothetisch stationair Gaussisch proces met een constante spectrale dichtheid op de reële as.

De Brownse beweging $\beta(t)$ is gerelateerd aan ‘white noise’ volgens:

$$\beta(t) = \int_0^t W(s)ds, \quad \text{for } 0 \leq t \leq \infty \tag{2.2.10}$$

Deze vergelijking wordt ook vaak geschreven volgens:

$$d\beta(t) = \beta(t + dt) - \beta(t) = W(t)dt \tag{2.2.11}$$

Wanneer wordt aangenomen dat op t_0 het proces gelijk is aan β_0 kunnen de volgende eigenschappen van het proces worden benoemd. Het gemiddelde:

$$E\{\beta(t)\} = \beta_0 \tag{2.2.12}$$

en variantie

$$E\{[\beta(t) - \beta_0]^2\} = t - t_0 \tag{2.2.13}$$

Voor de random term uit de stochastische differentiaal vergelijking geldt eenzelfde:

$$E\{d\beta(t)\} = 0 \tag{2.2.14}$$

$$E\{[d\beta(t)]^2\} = dt \tag{2.2.15}$$

We kunnen stellen dat de $d\beta(t)$'s onafhankelijk zijn van elkaar en van de beginwaarde $\beta(t)$, en dat de verdeling van $d\beta(t)$ Gaussisch is.

De stochastische differentiaal vergelijking kan nu worden geïnterpreteerd als een stochastische integraal. De oplossing wordt nu:

$$X_t = X_0 + \int_{t_0}^t f(s, X_s)ds + \int_{t_0}^t g(s, X_s)d\beta_s, \quad \text{for } 0 \leq t_0 \leq t \leq \infty \quad (2.2.16)$$

De tweede integraal is een stochastische integraal. Deze integraal kan niet worden opgelost met de gebruikelijke calculus. De meest gebruikte methoden voor het oplossen van deze integraal zijn die van Itô en Stratonovich.

We nemen aan dat $E\{|g(t, x)|^2\} < \infty$ voor alle $t \in [0, T]$, en dat $g(t, x)$ is continu op het interval $[0, T]$ en onafhankelijk van de $d\beta_t$. Laat \mathcal{P} een partitie zijn van $[0, T]$ volgens:

$$0 = b_0 < t_1 < \dots < t_n = T \quad (2.2.17)$$

De integraal is nu gedefinieerd in onze limiet volgens:

$$\int_{\mathcal{P}} g(t, x)d\beta_t = \text{l.i.m.}_{\Delta t \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} g(t'_i, x)(\beta_{t_{i+1}} - \beta_{t_i}) \quad (2.2.18)$$

met $\Delta t = \max_i(t_{i+1} - t_i)$ en $t'_i \in [t_i, t_{i+1}]$. Het verschil tussen de interpretaties van Itô en Stratonovich is de locatie waar de functie g wordt gekozen. Bij Itô is dit $t'_i = t_i$ en bij Stratonovich is dit $t'_i = \frac{1}{2}(t_i + t_{i+1})$. De Itô manier is het makkelijkst en wordt het vaakst gebruikt. De transformatie tussen beide methoden gaat volgens:

$$dX_t \stackrel{Itô}{=} f(t, X_t)dt + g(t, X_t)d\beta_t \quad (2.2.19)$$

$$\downarrow$$

$$dX_t \stackrel{Str}{=} f(t, X_t)dt + g(t, X_t)d\beta_t - \frac{1}{2}g(t, X_t)\frac{\partial g}{\partial x}\Big|_{(t, X_t)}dt \quad (2.2.20)$$

2.2.1 Colored noise

Hoewel 'white noise' theoretisch goed werkt, is het wel een probleem dat het proces nergens differentieerbaar is. Hierdoor zal bij het oplossen de convergentie van een numeriek schema niet groot zijn, namelijk orde 1. In [5] is hiervoor op zoek gegaan naar een tijdgecorreleerde vorm van 'white noise'. Dit is gevonden in de vorm van 'colored noise'. Het wordt gevonden door het integreren van het 'white noise' proces. Voor het verkrijgen van een k -keer differentieerbaar proces, moet het 'white noise' proces $k + 1$ keer geïntegreerd worden. Dit proces dat $\underline{u}(t)$ wordt genoemd is de oplossing van de vergelijking:

$$\dot{u}(t) = -\frac{1}{a}u(t) + \frac{1}{a}W(t) \quad (2.2.21)$$

Hierin is $W(t)$ het 'white noise' proces en a is een karakteristieke factor. De vergelijking genereert een nul-gemiddeld, stationair, exponentieel gecorreleerd Gaussisch proces.

2.3 De Fokker-Planck vergelijking

Met behulp van de Fokker-Planck vergelijking gaan we later een verband leggen tussen het advection-diffusie model en het deeltjesmodel. De Fokker-Planck vergelijking beschrijft de verandering in de tijd van de kansdichtheidfunctie van de positie van een deeltje. De vergelijking is genoemd naar Adriaan Fokker, een Nederlands fysicus en musicus en Max Planck, een Duitse fysicus. De vergelijking staat ook bekend als de voorwaartse vergelijking van Kolmogorov, een Russische wiskundige. Wij gebruiken de Fokker-Planck vergelijking voor de statistische beschrijving van de Brownse beweging van een deeltje in een vloeistof, ofwel ons advection-diffusie model. Dit was ook het eerste doel van de vergelijking. Eéndimensionaal wordt de vergelijking als volgt beschreven:

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x, t)p(x, t)] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}[(g(x, t))^2p(x, t)] \quad (2.3.1)$$

De algemene vergelijking in N -dimensies is:

$$\frac{\partial}{\partial t}p(\mathbf{x}, t) = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i}[\mathbf{f}_i(x_1, \dots, x_N, t)p(\mathbf{x}, t)] + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}[(\mathbf{g}_i(x_1, \dots, x_N, t))^2p(\mathbf{x}, t)] \quad (2.3.2)$$

Wij gaan deze vergelijking gebruiken voor drie dimensies.

2.4 Numerieke methoden voor het oplossen van de stochastische differentiaalvergelijkingen

2.4.1 Expliciet Euler schema

Aangezien het model zal bestaan uit stochastische differentiaalvergelijkingen, die complex en non-lineair zijn, kan er geen exacte oplossing worden gevonden. Er moet dus een stochastisch numeriek schema worden gebruikt. Het schema dat het meest wordt gebruikt, is het Euler schema. Dit schema wordt ook in dit project toegepast. Het is favoriet aangezien het erg simpel is, makkelijk in gebruik, makkelijk te implementeren, goedkoop en het geeft redelijke resultaten. Helaas heeft dit schema ook een aantal nadelen. Het heeft slechte convergentie, waardoor veel tijdstappen nodig zijn en dus veel berekeningen. Ook leidt dit schema tot slecht gedrag in de buurt van grenzen van het gebied. Het schema is gevormd volgens stochastische Taylor expansie in Itô vorm met het kleinste aantal termen. Het algemene schema is als volgt:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_0^{\Delta t} &= \mathbf{x}_0 \end{aligned} \quad (2.4.1)$$

Hierin in de $\Delta\beta_k$ een Gauss random trekking met gemiddelde 0 en variantie Δt . Dit kunnen we ook schrijven als $\sqrt{\Delta t} \cdot \Delta\alpha$ waarbij de $\Delta\alpha$ verdeeld is volgens $N(0, 1)$.

2.4.2 Impliciet Euler schema

Het makkelijkste impliciete schema is impliciet Euler. Deze methode is net zo nauwkeurig als de expliciete methode van Euler, maar is stabielier. Helaas vergt het meer geheugen en tijd. Het schema heeft de vorm:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \tilde{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_{k+1}, \tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \tilde{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_0^{\Delta t} &= \mathbf{x}_0\end{aligned}\tag{2.4.2}$$

We kunnen ook een familie van impliciete Euler schema's opstellen volgens:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \tilde{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \{(1 - \alpha)\mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t}) + \alpha\mathbf{f}(t_{k+1}, \tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t})\}\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \tilde{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_0^{\Delta t} &= \mathbf{x}_0\end{aligned}\tag{2.4.3}$$

Bij $\alpha = 0$ volgt het Euler schema, $\alpha = 1$ het impliciete schema en $\alpha = 0,5$ het zogenaamde trapezoïde schema.

Opmerking: Wanneer $\alpha \neq 0$ lossen deze schema's niet de $\hat{\text{Ito}}$ vergelijking op, maar bijvoorbeeld voor $\alpha = 0,5$ die van Stratonovich.

2.4.3 Milstein schema

Met een term meer in de stochastische Taylor expansie dan bij het Euler schema, ontstaat het Milstein schema:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k + \frac{1}{2}\mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\frac{\partial\mathbf{g}}{\partial\mathbf{x}}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\{(\Delta\beta_k)^2 - \Delta t\} \\ \bar{\mathbf{X}}_0^{\Delta t} &= \mathbf{x}_0\end{aligned}\tag{2.4.4}$$

Dit schema heeft een iets betere convergentie dan het Euler schema. Maar er moet wel een afgeleide gevonden kunnen worden.

Er bestaat ook een impliciete variant van het schema, deze is impliciet op de de driftterm.

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_{k+1}, \bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k + \frac{1}{2}\sigma(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\frac{\partial\mathbf{g}}{\partial\mathbf{x}}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\{(\Delta\beta_k)^2 - \Delta t\} \\ \bar{\mathbf{X}}_0^{\Delta t} &= \mathbf{x}_0\end{aligned}\tag{2.4.5}$$

2.4.4 Heun schema

Om niet te maken te krijgen met afgeleides, zijn er ook expliciete methoden. Het Heun schema is hier een voorbeeld van. Dit schema heeft dezelfde convergentie als het Milstein schema, maar heeft geen afgeleide nodig. Hierbij moet wel weer worden opgemerkt dat dit

schema geen $\hat{\text{Ito}}$ vergelijking oplost, maar een Stratonovich vergelijking. Bij het omschrijven naar $\hat{\text{Ito}}$ is er wel een afgeleide nodig. Het Heun schema ziet er als volgt uit:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta t + \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t})\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \frac{1}{2}(\mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t}) + \mathbf{f}(t_{k+1}, \tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t}))\Delta t + \frac{1}{2}(\mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t}) + \mathbf{g}(t_{k+1}, \tilde{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t}))\Delta\beta_k \\ \bar{\mathbf{X}}_0^{\Delta t} &= \mathbf{x}_0\end{aligned}\tag{2.4.6}$$

2.4.5 Runge-Kutta schema

Aangezien voor het omschrijven maar één afgeleide nodig is, kunnen er ook hogere orde expliciete schema's gebruikt worden die nog betere convergentie hebben. Het Runge-Kutta schema is hier één van.

$$\begin{aligned}K_0 &= \mathbf{f}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t}) & G_0 &= \mathbf{g}(t_k, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t}) \\ \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (0)} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \frac{1}{2}K_0\Delta t + \frac{1}{2}G_0\Delta\beta_k \\ K_1 &= \mathbf{f}(t_k + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (0)}) & G_1 &= \mathbf{g}(t_k + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (0)}) \\ \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (1)} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \frac{1}{2}K_1\Delta t + \frac{1}{2}G_1\Delta\beta_k \\ K_2 &= \mathbf{f}(t_k + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (1)}) & G_2 &= \mathbf{g}(t_k + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (1)}) \\ \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (2)} &= \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \frac{1}{2}K_2\Delta t + \frac{1}{2}G_2\Delta\beta_k \\ K_3 &= \mathbf{f}(t_k + \Delta t, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (2)}) & G_3 &= \mathbf{g}(t_k + \Delta t, \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t, (2)})\end{aligned}$$

$$\bar{\mathbf{X}}_{k+1}^{\Delta t} = \bar{\mathbf{X}}_k^{\Delta t} + \frac{1}{6}(K_0 + 2K_1 + 2K_2 + K_3)\Delta t + \frac{1}{6}(G_0 + 2G_1 + 2G_2 + G_3)\Delta\beta_k \tag{2.4.7}$$

Op dit punt blijkt dit schema het beste schema te zijn, wegens zijn convergentie-gedrag en efficiëntie.

N.B. Er bestaan ook nog de zogenaamde extrapolatie methoden, een voorbeeld hiervan is de Richardson methode. Voor uitleg over deze methode wordt verwezen naar [4] of [5].

2.4.6 Verschil horizontale en verticale spreiding

Aangezien de horizontale en verticale verplaatsingen van de deeltjes geheel onafhankelijk kan worden gemodelleerd, kan er voor de beide richtingen een ander schema gebruikt worden. Zo kan voor de verticale richting, waarbij de afstanden relatief veel korter zijn dan in de horizontale richtingen een fijner grid gebruikt worden met een hogere orde schema.

2.5 Simulatie

Naar aanleiding van [3] worden hier tenslotte nog vier punten genoemd die belangrijk zijn om bij stil te staan bij het simuleren van vervuilingstransport.

Allereerst moet voor het vinden van de juiste oplossing voldaan worden aan ten minste twee voorwaarden. Dit zijn positieve waarden voor concentraties en behoud van massa. Hoewel het deeltjesmodel altijd aan deze voorwaarden voldoet, kunnen bij het koppelen van de snelheden aan een model verschillen ontstaan die er voor zorgen dat het niet meer klopt. De oplossing voor het probleem dat ontstaat, bestaat uit twee mogelijkheden. De ene mogelijkheid is ervoor zorgen dat het model van de snelheden vrijwel exact overeenkomt met het model van transport. Ze moeten dus consistent met elkaar zijn. De tweede mogelijkheid is het toepassen van correcties voordat de modellen samen worden gebracht.

De andere twee punten hebben te maken met het verkleinen van de hoeveelheid data die moet worden opgeslagen ten tijde van berekenen. Soms kan deze hoeveelheid gigantisch oplopen. Het verkleinen hiervan is dan noodzaak. Hiervoor worden twee oplossingen aangedragen. Er kan bij sommige modellen periodiciteit in de snelheden worden aangenomen. Dit houdt bijvoorbeeld in dat steeds de snelheden van een keer eb en vloed meerdere keren achter elkaar worden gebruikt. Hierbij moet wel bijzonder goed worden opgelet dat de snelheden bij een nieuwe periode aansluiten bij de vorige periode. Een tweede oplossing is 'time integrated flow' data. Dit houdt in het kort in dat je de snelheden van een aantal kleine tijdstappen zo combineert, dat je de snelheid van een grotere tijdstap vindt. Bijkomend voordeel van deze methode is dat je de tijdstap van de transport berekening verschillend kan kiezen van de tijdstap in het snelheden model.

Hoofdstuk 3

Model

3.1 Inleiding

Het reverse-time advection-diffusiemodel, gesimuleerd met behulp van een deeltjesmodel, is gebaseerd op vijf concepten:

- Advection-diffusiemodel
- Stochastische differentiaal vergelijkingen
- Fokker-Planck vergelijking
- Discretisatie volgens Eulerschema van deeltjesmodel
- Achterwaartse vergelijking van Kolmogorov

Deze concepten zullen aan bod komen in de komende paragrafen van dit hoofdstuk. Het advection-diffusiemodel is het model dat beschrijft hoe de vervuiling zich verplaatst in een vloeistof. Het afleiden van dit model komt aan de orde in de eerste twee paragrafen. Dit model kan ook wel worden geïnterpreteerd als een voorwaartse vergelijking van Kolmogorov of Fokker-Planck vergelijking. Deze vergelijking zegt ons dat de oplossing van het advection-diffusie model ook kan worden bekeken als een kansverdeling van een deeltjesmodel. Dit idee kwam ook al naar voren in het proefschrift van Einstein, zie [1]. Naast de voorwaartse vergelijking van Kolmogorov, is er ook de achterwaartse vergelijking van Kolmogorov. Deze vergelijking hebben we nodig voor ons reverse-time model. Wij zullen dan ook hier op zoek gaan hoe we deze vergelijking kunnen schrijven net als de voorwaartse, want op die manier kunnen we de Fokker-Planck vergelijking toepassen om zo het deeltjesmodel te kunnen gebruiken. Met behulp van de Fokker-Planck vergelijking vinden we namelijk stochastische differentiaal vergelijkingen die we vervolgens discretiseren met een Euler-schema. Zo hebben we ons deeltjes-model gevonden.

Opmerking Wanneer we praten over een voorwaarts model, interpreteren de meeste mensen de oplossing als concentratie van deeltjes in een vloeistof. In het achterwaartse model zijn de resultaten niet meer reëel te interpreteren als concentraties. Wij spreken hier over kansen. Wat is de kans dat een deeltje dat is aangetroffen op een bepaalde plaats zich hiervoor op een andere plek bevond.

3.2 De Diffusievergelijking

3.2.1 Eén-dimensionaal

We beginnen met het afleiden van de diffusievergelijking. Hiervoor bekijken we eerst *moleculaire diffusie* in een *stationaire* vloeistof. In 1855 publiceerde een Duitse natuurkundige, genaamd Adolph Fick, een paper waarin hij Fourier's hitte-vergelijking vergeleek met het proces van moleculaire diffusie.

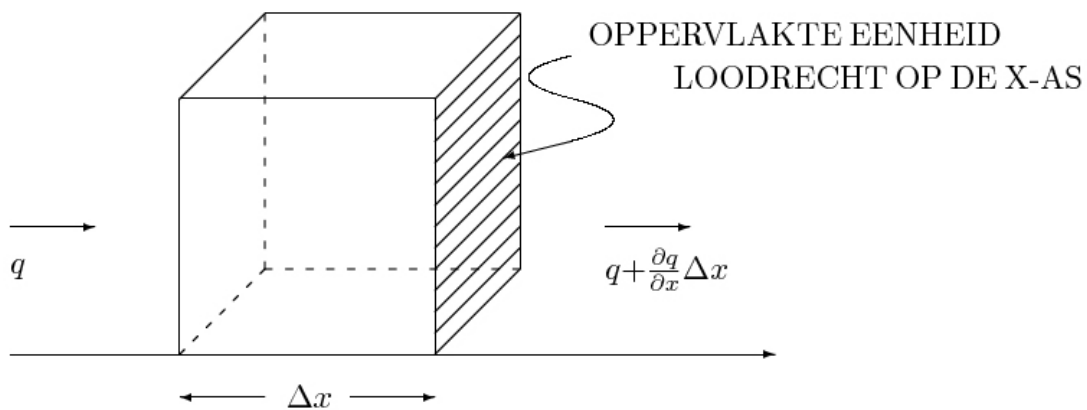
Fick's wet stelt dat de flux van een opgeloste massa proportioneel is aan de gradient van de concentratie van de oplossing in dezelfde richting als de flux. Een-dimensionaal houdt dit in:

$$q = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.2.1)$$

Hierin is q de flux van de opgeloste massa, C is de concentratie van de oplossing en D is de diffusie-coëfficiënt. In ons model nemen we deze coëfficiënt constant. Omdat transport van hoge naar lage concentraties gaat, hebben we te maken met het minteken. In vector notatie geldt vanzelfsprekend het volgende:

$$\mathbf{q} = -D \nabla C \quad (3.2.2)$$

Hierin is \mathbf{q} de vector met componenten (q_x, q_y, q_z) in Cartesische coördinaten.



Figuur 3.1: Het volume voor aankomende vergelijking (3.2.5)

We gaan nu kijken naar een een-dimensionaal transportproces waarin we de massa transporteren in de x richting. Twee parallelle oppervlakken met oppervlakte 1 worden orthogonaal op de x as geplaatst op een afstand Δx uit elkaar. We nemen nu de concentratie $C(x, t)$ op het punt x op tijdstip t . Nu is er een massa $C(x, t)\Delta x$ in het stuk tussen de twee oppervlakken. Aangezien de moleculen bewegen, is er een verschil in massa in het volume als de tijd verstrijkt. Dit massa-verschil kunnen we aanduiden met:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \Delta x \quad (3.2.3)$$

Dit moet gelijk zijn aan het verschil in de flux, door de twee parallelle oppervlakken. We nemen aan dat de flux door het ene oppervlak gelijk is aan $q(x, t)$ en dan is de flux aan de andere kant:

$$q(x, t) + \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \Delta x \quad (3.2.4)$$

En het verschil tussen deze twee is $\frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \Delta x$. Dankzij de wet van massabehoud moet dit verschil in flux gelijk zijn aan het massa verschil in de tijd. We krijgen dan wanneer we aannemen dat $\lim \Delta x \rightarrow 0$ en $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (3.2.5)$$

Fick's wet, die we eerder al hebben gevonden, namelijk: $q = -D \frac{\partial C}{\partial x}$ vullen we in in de vorige vergelijking. We krijgen nu de algemene *diffusievergelijking*.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (3.2.6)$$

Als we de diffusiecoëfficiënt constant nemen, krijgen we:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad (3.2.7)$$

3.2.2 Vectornotatie

Het één dimensionale verhaal uit de vorige paragraaf kunnen we uitbreiden naar meer dimensies. Hiervoor maken we gebruik van vectornotatie. We nemen een vast volume V met oppervlakte S . De concentratie van de opgeloste massa is nu een function van positie \mathbf{x} en tijd t . De totale massa in het volume is nu:

$$\int_V C(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.2.8)$$

De massaflux wordt $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ en uit behoud van massa volgt nu:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V C(\mathbf{x}, t) dV + \int_S (\mathbf{q}(\mathbf{x}, \mathbf{n})) dS = 0 \quad (3.2.9)$$

Hierin is \mathbf{n} de eenheids vector uit het oppervlakte element dS . Aangezien we hebben aangenomen dat V een vast volume is en door gebruik te maken van de divergentie-theorie $\int_S \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla \cdot \mathbf{q} dV$ krijgen we:

$$\int_V \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} \right) dV = 0 \quad (3.2.10)$$

En aangezien we het volume willekeurig mogen kiezen geldt:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} \quad (3.2.11)$$

Nu maken we weer gebruik van Fick's wet en krijgen we weer de diffusievergelijking, maar nu in vectornotatie.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D\nabla C) \quad (3.2.12)$$

Voluit in Cartesische coördinaten is dit:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (3.2.13)$$

Wanneer we de diffusiecoëfficiënt constant aannemen, wordt de vergelijking:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (3.2.14)$$

3.2.3 Een oplossing

De meest fundamentele oplossing van de diffusievergelijking beschrijft de verspreiding door diffusie van een initiële hoeveelheid massa M op tijdstip nul in de oorsprong. Aangezien de vergelijking lineair is, kan de oplossing gebruikt worden voor het bouwen van oplossingen van moeilijker problemen.

We gaan op zoek naar de fundamentele oplossing door middel van dimensionale analyse in één dimensie. De concentratie $C(x, t)$ kan alleen afhangen van M , x , t en D . En aangezien het proces lineair is, is C evenredig met de massa M . In één dimensie is de eenheid van de concentratie massa per lengte-eenheid, en daarom zal C evenredig zijn met M gedeeld door een *karakteristieke lengte*. De eenheid van de diffusiecoëfficiënt is lengte maal lengte gedeeld door de tijd. Hieruit kunnen we concluderen dat we \sqrt{Dt} als de karakteristieke lengte mogen nemen. Hieruit kunnen we dus alvast de volgende formule opstellen:

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} f \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) \quad (3.2.15)$$

Aangezien de factoren 4π en 4 in de uiteindelijke oplossing ook voorkomen, zetten we ze er nu alvast tussen. We gaan nu de diffusievergelijking omschrijven naar een ODE door vergelijking (3.2.15) te substitueren in de diffusievergelijking en $\frac{x}{\sqrt{4Dt}}$ te vervangen door η . We houden het volgende over:

$$\frac{df}{d\eta} + 2\eta f = 0 \quad (3.2.16)$$

De oplossing hiervan is:

$$f = C_0 e^{-\eta^2} \quad (3.2.17)$$

De totale hoeveelheid massa is altijd constant, dus als we integreren over de gehele x -as vinden we altijd dezelfde massa.

$$\int_{-\infty}^{\infty} C dx = M \quad (3.2.18)$$

Nu kunnen we op zoek gaan naar de C_0 uit vergelijking (3.2.17) door vergelijkingen (3.2.16) en (3.2.15) te substituëren in vergelijking (3.2.18) en de integratie uit te voeren. Hieruit vinden we dat C_0 altijd 1 is, en daarom vinden we als *fundamentele oplossing*:

$$C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (3.2.19)$$

3.3 De Advectie-Diffusievergelijking

In de vorige paragraaf zijn we op zoek gegaan naar massatransport door diffusie in een stilstaande vloeistof.

In deze paragraaf gaan we onderzoeken wat er verandert als de vloeistof niet stilstaat maar beweegt met een snelheid \mathbf{u} . Deze snelheidsvector \mathbf{u} bestaat uit de volgende componenten in de x , y en z richtingen: u , v en w . Het massatransport dat plaatsvindt dankzij de beweging van de vloeistof noemen we *advectie*. Hierbij nemen we aan dat de processen advectie en diffusie afzonderlijke, additieve processen zijn. Ook nemen we aan dat de diffusiecoëfficiënt in alle richtingen gelijk is, dus die nemen we constant.

Het massatransport dat plaatsvindt door een oppervlakte in het yz vlak door de snelheidscomponent in de x richting is de hoeveelheid uC , omdat dat de snelheid is waarmee de vloeistof door het oppervlakte gaat, vermenigvuldigt met de concentratie van de massa in de vloeistof. De totale hoeveelheid massatransport is dan de advectieve flux plus de diffusieve flux

$$q = uC + -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.3.1)$$

Deze vergelijking substitueren we in de vergelijking die ontstaan is uit het behoud van massa (vergelijking (3.2.5)). We vinden de al bekende algemene diffusievergelijking, maar nu inclusief de advectieve term:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = \frac{\partial}{\partial x}\left(D \frac{\partial C}{\partial x}\right) \quad (3.3.2)$$

Voor drie dimensies geeft dat uiteraard in vectornotatie het volgende:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{u}) = \nabla(D\nabla C) \quad (3.3.3)$$

Met de diffusiecoëfficiënt constant krijgen we:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.3.4)$$

En voor drie dimensies geeft dat in vectornotatie:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{u}) = D\nabla^2 C \quad (3.3.5)$$

Als we nu het behoud van vloeistofvolume meenemen, ofwel $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, dan krijgen we in het algemeen:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla(D\nabla C) \quad (3.3.6)$$

En volledig uitgeschreven in Cartesische coördinaten wordt dat:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} + w\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(D\frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(D\frac{\partial C}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(D\frac{\partial C}{\partial z}) \quad (3.3.7)$$

En weer met de diffusiecoëfficiënt constant:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = D\nabla^2 C \quad (3.3.8)$$

En:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} + w\frac{\partial C}{\partial z} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (3.3.9)$$

3.4 Stochastische Differentiaal vergelijkingen

We kunnen drie stochastische differentiaal vergelijkingen opstellen, die ook de positie van deeltjes beschrijven.

$$dX_t = f_1(X_t, Y_t, Z_t, t) * dt + g_1(X_t, Y_t, Z_t, t) * d\beta_{1,t} \quad (3.4.1)$$

$$dY_t = f_2(X_t, Y_t, Z_t, t) * dt + g_2(X_t, Y_t, Z_t, t) * d\beta_{2,t} \quad (3.4.2)$$

$$dZ_t = f_3(X_t, Y_t, Z_t, t) * dt + g_3(X_t, Y_t, Z_t, t) * d\beta_{3,t} \quad (3.4.3)$$

Nu kunnen we met behulp van de Fokker-Planck vergelijking, die de verdeling beschrijft van de positie van de deeltjes, de stochastische differentiaal vergelijkingen koppelen aan het advection-diffusie model. Voor meer informatie over deze koppeling, zie [5].

Hierbij vinden we de drifttermen f_i en we gebruiken de diffusiecoëfficiënten volgens:

$$f_1 = u + \frac{\partial D_1}{\partial x}, f_2 = v + \frac{\partial D_2}{\partial y}, f_3 = w + \frac{\partial D_3}{\partial z}$$

$$g_1 = \sqrt{2D_1}, g_2 = \sqrt{2D_2}, g_3 = \sqrt{2D_3}$$

Als we deze grootheden invullen in de Fokker-Planck vergelijking krijgen we precies de advection-diffusie vergelijking. Dat betekent dat het deeltjesmodel consistent is met de advection-diffusie vergelijking.

NB We gaan $D_1 = D_2$ kiezen in ons model.

De $\beta_{i,t}$ in de differentiaal vergelijkingen komen van de eerder besproken Brownse beweging. Zij geven een random beweging mee aan de deeltjes, volgens $\sqrt{\Delta t}$ keer een random getal. Dit random getal is een normaal verdeelde variabele $\sim N(0,1)$.

3.5 Deeltjesmodel

Laten we nu nog eens terugkijken naar onze advection-diffusie vergelijking:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (3.5.1)$$

Met behulp van de Fokker-Planck vergelijking hebben we de koppeling met stochastische differentiaalvergelijkingen, gevonden in de vorige paragraaf. Het gevonden stelsel differentiaalvergelijkingen gaan we nu discretiseren. Nu kunnen we voor elk los deeltje zijn plaats op een volgend tijdstip implementeren. De implementatie gaat als volgt:

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t + \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D\Delta}\beta_t \quad (3.5.2)$$

Nu rest ons nog het juiste reverse-time model te vinden.

3.6 Achterwaarts

Met een beetje omschrijven hebben we de volgende vergelijking gevonden voor het *advection-diffusie model* in één dimensie:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X} (uC) + \frac{\partial}{\partial X} \left(D \frac{\partial C}{\partial X} \right) \quad (3.6.1)$$

We hebben nu dus het voorwaartse model gevonden van de verspreiding in een vloeistof, maar we zijn juist geïnteresseerd in het achterwaarts berekenen, om te kijken waar de vervuiling vandaan gekomen kan zijn. Dit gaan we bekijken in deze paragraaf.

Aangezien we achterwaarts niet meer over concentraties kunnen spreken schrijven we $C = G$, om zo de interpretatie concentratie te verliezen. Met behulp van de twee onderstaande formules kunnen we bovenstaande vergelijking omschrijven.

$$D = B \quad (3.6.2)$$

$$u = A - \frac{\partial}{\partial X} B \quad (3.6.3)$$

Hieruit volgt een nieuwe vergelijking:

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X}(AG) + \frac{\partial^2}{\partial X^2}(BG) \quad (3.6.4)$$

Dit is de *Fokker-Planck* vergelijking, ook wel de *Ito-Fokker-Planck* vergelijking genaamd. Deze formule staat ook bekend als de *voorwaartse vergelijking van Kolmogorov*. De *achterwaartse vergelijking* is:

$$\frac{\partial G}{\partial \theta} = -A \frac{\partial G}{\partial \xi} - B \frac{\partial^2 G}{\partial \xi^2} \quad (3.6.5)$$

We hebben gezien dat we met behulp van Fokker-Planck ons voorwaartse model kunnen zien als een kansverdeling, die gelijk is aan de verdeling van een deeltjesmodel. We willen dus de achterwaartse vergelijking ook kunnen zien als een deeltjesmodel. We gaan nu op zoek hoe we de vergelijking kunnen herschrijven tot ze dezelfde vorm heeft als de voorwaartse vergelijking.

Door de vergelijking te herschrijven krijgt men:

$$\frac{\partial G}{\partial \theta} = - \left[A - \frac{\partial}{\partial \xi} B \right] \frac{\partial}{\partial \xi} G - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (BG) + \frac{\partial}{\partial \xi} (G \frac{\partial}{\partial \xi} B) \quad (3.6.6)$$

We hebben al gezien dat de divergentie van u nul is. En dus kunnen we schrijven:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (A - \frac{\partial}{\partial \xi} B) = 0 \quad (3.6.7)$$

En nu bestaat dus de volgende gelijkheid:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left[(A - \frac{\partial}{\partial \xi} B) G \right] = (A - \frac{\partial}{\partial \xi} B) \frac{\partial G}{\partial \xi} \quad (3.6.8)$$

Dus kunnen we schrijven:

$$\frac{\partial G}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \xi}(A^*G) - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}(BG) \quad (3.6.9)$$

met

$$A^* = -A + 2\frac{\partial}{\partial \xi}B \quad (3.6.10)$$

Als we nu de tijd omdraaien volgens $\theta' = -\theta$ krijgen we:

$$\frac{\partial G}{\partial \theta'} = -\frac{\partial}{\partial \xi}(A^*G) + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}(BG) \quad (3.6.11)$$

Nu ziet de vergelijking er hetzelfde uit als de voorwaartse vergelijking met:

$$A^* = -u + \frac{\partial}{\partial \xi}B \quad (3.6.12)$$

En als we de flux omdraaien volgens $a = -u$ kunnen we schrijven:

$$a = A^* - \frac{\partial}{\partial \xi}B \quad (3.6.13)$$

We hebben nu dus gevonden dat we alleen de tijd en de snelheid moeten omdraaien om eenzelfde model te krijgen dat we kunnen oplossen. Voor de implementatie houdt dit in dat alleen de snelheid moet worden omgedraaid. In je hoofd moet er bij het interpreteren van de resultaten, bij stil worden gestaan dat er terug in de tijd is gerekend, dit is het gevolg van het omdraaien van de tijd in het model. Wat opmerkelijk is, is dat er niets verandert aan de diffusiecoëfficiënt!

3.7 Samenvatting

We hebben nu gevonden:

1. Het advection-diffusie model dat de beweging beschrijft van deeltjes in een vloeistof, volgens:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} + w\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(D\frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(D\frac{\partial C}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(D\frac{\partial C}{\partial z}) \quad (3.7.1)$$

2. Stochastische differentiaalvergelijkingen die dezelfde beweging van de deeltjes beschrijven, dankzij de Fokker-Planck vergelijking.
3. Het gediscrètiseerde model met behulp van Euler volgens:

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t + \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\beta_t \quad (3.7.2)$$

4. Dit voorwaartse model kunnen we herschrijven als een achterwaarts model door de tijd en de snelheid om te draaien, dankzij de Kolmogorov-backward vergelijking. Hierdoor moeten we de resultaten interpreteren als kansen.

$$\frac{\partial C}{\partial t} - u \frac{\partial C}{\partial x} - v \frac{\partial C}{\partial y} - w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (3.7.3)$$

met

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t - \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\beta_t \quad (3.7.4)$$

Vergeet niet dat we terug in de tijd rekenen!

Met behulp van deze kennis wordt een computermodel opgesteld om de beweging te simuleren.

Hoofdstuk 4

SIMONA

Voor het genereren van de snelheden die nodig zijn voor het doorrekenen van het model in de testcase, is gebruik gemaakt van het programma SIMONA. Dit programma is van het RIKZ, het Rijksinstituut voor kust en zee, dit is een onderdeel van Rijkswaterstaat. In dit hoofdstuk komt in het kort het hoe en wat van SIMONA aan bod¹.

4.1 Rijkswaterstaat

Rijkswaterstaat² staat voor water, wegen en werken. Het is de uitvoeringsorganisatie die in opdracht van de minister en de staatsecretaris van Verkeer en Waterstaat de nationale infrastructurele netwerken beheert en ontwikkelt. Rijkswaterstaat heeft vier grote doelen voor ogen:

- Droge voeten
- Voldoende en schoon drinkwater
- Vlot en veilig verkeer over weg en water
- Betrouwbare en bruikbare informatie

4.2 SIMONA

De SIMONA staat voor Simulatie Modellen Natte Waterstaat. Het is een verzameling wiskundige simulatie modellen die hydrodynamische processen beschrijven. SIMONA is al meer dan 10 jaar het belangrijke waterloopkundig kennissysteem van Rijkswaterstaat. Het is ontstaan uit de vraag naar effectief waterbeheer, rekening houdend met een confronterende gebruiksfunctie. Naast de humane vraag moet er ook rekening gehouden worden met milieu en duurzame ontwikkeling. Dit vergt veel kennis en door al deze kennis samen te bundelen is het technische wetenschappelijk kennissysteem ontstaan.

SIMONA bestaat uit vier modellen voor het simuleren van waterloopkundige fenomenen:

¹Bron: www.rijkswaterstaat.nl/rws/rikz/projecten/simona/

²Bron: www.rijkswaterstaat.nl

- **Waqua:** simulatie waterbeweging en transport van in water opgeloste stoffen in 2D
- **Triwaq:** simulatie waterbeweging en transport van in water opgeloste stoffen in 3D
- **Simpar:** Simulatie deeltjes in water
- **Slib3d:** Simulatie transport slib in water

4.2.1 Doelen SIMONA

De fysische processen in onze zeëen en rivieren zijn complex. Hierop een kunstmatige ingreep doen, kan leiden tot ongewenste gevolgen en onvoorziene effecten. SIMONA helpt in het voorspellen hiervan. Ook simuleert SIMONA extreme waterloopkundige omstandigheden en ze kan waterstanden voorspellen met grote nauwkeurigheid. In het handhaven van de 'Wet op de Waterkeringen' speelt SIMONA een belangrijke rol. SIMONA wordt onder andere gebruikt bij het KNMI, de Stormvloedwaarschuwingsdienst, en de haven van Rotterdam.

4.3 Achtergrond

In 1916 leidt een stormramp tot het afsluiten van de Zuiderzee. Nobelprijswinnaar Lorentz rekt op vraag van de regering de voorspelde gevolgen uit van de ingreep. In die tijd was dat een groot karwei. Met een groep mensen werd alles met pen en papier doorgerekend. Toch zag Rijkswaterstaat in, dat deze manier van gevolgen voorspellen alvorens een ingreep te doen, erg waardevol is. In de tijd dat de computer zijn intrede doet, wordt hier gebruik van gemaakt. Rond die tijd wordt ook begonnen met het aanleggen van de Deltawerken, hierbij wordt veelvuldig gebruik gemaakt van de methode. Hieruit ontstaat het programma WAQUA. In het begin krijgt WAQUA steeds meer verschillende versies voor verschillende doeleinden. In 1988 komt hier een einde aan, wanneer Rijkswaterstaat het kennissysteem SIMONA presenteert met de volgende doelstelling: *"Het bevorderen van een doelmatige en doelgerichte informatievoorziening binnen de natte sector van de Rijkswaterstaat en binnen het waterbeheer in het algemeen. Deze informatievoorziening heeft betrekking op het genereren van informatie door middel van 2D/3D computersimulatiemodellen"*. Sinds 2000 is er een langlopend project gestart met WL-Delft, die het programma Delft3D ontwikkeld heeft, om de twee systemen samen te voegen onder de naam OMS, Open Modellen Systeem.

4.4 TRIWAQ

In dit project wordt gebruik gemaakt van het onderdeel TRIWAQ. Hier volgt een korte beschrijving van dit onderdeel. Met Triwaq kunnen waterstanden, waterstromingen en concentraties opgeloste stoffen in open wateren als meren, zeëen, rivieren en estuaria worden berekend in 3D. Triwaq kan het fysisch gedrag van watersystemen nauwkeuriger benaderen dan in 2D. Hiervoor is wel een langere rekestijd en een groter gebruik van computer geheugen nodig. Het programma wordt voornamelijk gebruikt bij grote verticale verschillen, zoals de uitstroom van zoet water uit de Nieuwe Waterweg in de Noordzee en randzeëen waar 3D-circulaties een grote rol spelen.

4.5 Toepassingen

Een aantal toepassingen van SIMONA op een rijtje:

Locatie/Instelling	Toepassing
Limburg (Maaswerken)	Hoogwaterbescherming, vaarwegverbetering
Zuid-Holland	Doorstroombaarheid Biesbosch
Hydro-meteo centrum Rijnmond	Waterstanden en stroomsnelheden Noordzee
Hydro-meteo centrum Zeeland	Waterkeren, beheer, scheepvaart, calamiteiten
Zeeland (verdieping Westerschelde)	Waterstanden, getijvolumes, stroming, natuurcompensatie, geulwandverdediging, wrakkenberging
Oost-Nederland	Neutraliseren afwijkende afvoerverdeling
IJsselmeer gebied	Zoet-zout gradiënt voor brakwaterzone Afsluitdijk, morfologische ontwikkeling
Nautilus	Waterstanden, stromingen, zoutgehalte Noordzee
KNMI	Afgeven waarschuwingen en alarmeringen hoogwater en stormvloeden
Flyland (Vliegveldeiland)	Golfhoogtes, waterstanden, stroomsnelheden, slibtransport

Hoofdstuk 5

Onderzoek

In dit hoofdstuk wordt uitgelegd hoe de programma's voor het praktijkgedeelte van het onderzoek zijn opgesteld.

5.1 Eenvoudig model

5.1.1 Model voorwaarts

Voor het eenvoudige model is een gebiedje gemaakt, waarin de diepte wordt voorgeschreven en een zijkant. Dit kan worden geïnterpreteerd als een rand van de kust, van waaraf oneindig ver naar links, rechts en loodrecht op de kust verplaatst kan worden. Vervolgens wordt een beginpositie, dit is dus de plaats van lozing van de vervuiling, gedefiniëerd. Vervolgens wordt via een algoritme de verplaatsing van de deeltjes berekend. In een matrix worden per drie rijen (drie dimensies) per deeltje, alle locaties per tijdstap gezet. Dus elke kolom van de matrix geeft de locatie van de deeltjes in die tijdstap weer.

Om te checken of er aan de randvoorwaarden wordt voldaan, wordt per stap per dimensie gekeken of de nieuwe positie van een deeltje binnen de voorwaarden ligt. Is dit niet het geval dan wordt het deeltje in die voorwaarde de andere kant op gespiegeld. In de z -richting moet er aan twee voorwaarden worden voldaan. Na aanpassing van de positie dankzij de ene randvoorwaarde, kan er mogelijk niet aan de andere randvoorwaarde voldaan worden. Mocht dit het geval zijn, hoewel het in de praktijk hoogstwaarschijnlijk is, dan behoudt het deeltje zijn oude positie.

De volgende variabelen kunnen worden aangepast:

- Diffusiecoëfficiënt voor x - en y -richting
- Diffusiecoëfficiënt voor z -richting
- Snelheid x -richting
- Snelheid y -richting
- Snelheid z -richting
- Aantal deeltjes vervuiling
- Aantal tijdstappen

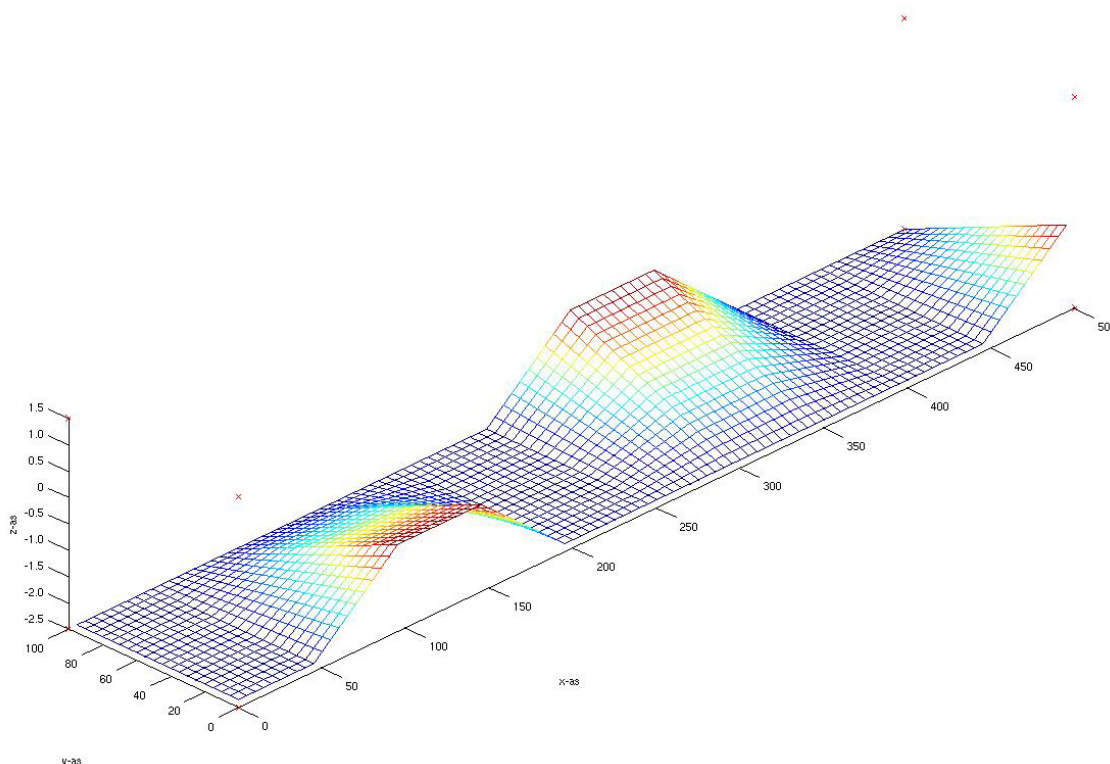
- Grootte tijdstap
- Randvoorwaarden

5.1.2 Model Achterwaarts

Het maken van het achterwaartse model is vrij simpel. Het enige dat in dit eenvoudige model moet worden gedaan, is het omdraaien van de snelheden. Dit hebben we in het hoofdstuk over het model kunnen lezen. Ook moet de tijd worden omgedraaid, maar dit hoeft niet in het model te worden gedaan. Er moet bij het interpreteren van de resultaten wel bij stil worden gestaan, dat er terug in de tijd wordt gerekend. Voor de code van dit model wordt verwezen naar bijlage (9.4).

5.2 Testcase

Vervolgens wordt er een model gemaakt voor de testcase uit [3]. Dit is een rechthoekig domein, dat een rivier voorstelt, die 500 meter lang is en 100 meter breed. De rivier heeft drie heuvels op de bodem. De rivierbodembodem ligt op 2,5 meter diepte onder de referentiehoogte. De golfbeweging in het model varieert van 0,5 tot 1,5 meter boven de referentiehoogte.



Figuur 5.1: Het grid van de testcase

5.2.1 Snelheden

Eerst moeten er snelheden gegenereerd worden met SIMONA. Er hoeft geen simulatie meer worden uitgevoerd. Alle gegevens zijn al aanwezig. Ze hoeven alleen nog uit SIMONA gehaald te worden. Dit kan met de hand, maar hier wordt gebruik gemaakt van matlab. Er wordt een input en een output file gegenereerd en de benodigde gegevens worden uit SIMONA gehaald. Deze benodigde gegevens zijn, de dieptepunten, de waterstandspunten, de dieptewaarden, de x-snelheden, de y-snelheden, de z-snelheden en de waterstanden. De laatste vier worden per tijdstap gegenereerd. Er worden gegevens opgeslagen voor 400 tijdstappen, in totaal 20 minuten in stappen van 3 seconden. Bij het opslaan van de tijdsafhankelijke gegevens wordt de naam van de bestanden aangepast, zodat ze bruikbaar zijn in matlab. Hiervoor wordt de tijdstap met 100 vermenigvuldigd en afgerond. Voor de code zie bijlage (9.5).

5.2.2 Het model voorwaarts

Het model bestaat uit drie delen. Allereerst de initialisatie van de gegevens. De bestanden met de gegevens worden ingelezen. Vervolgens worden er weer een aantal variabelen en constanten toegewezen, de diffusiecoëfficiënten, de randvoorwaarden in de x- en de y-richting, het aantal deeltjes, de dimensie, het aantal tijdstappen en de grootte van een tijdstap. Hierna wordt het domein geplot, waaronder de bodem. Tenslotte wordt de initiële input van de deeltjes gedefinieerd. Dit gebeurt ongeveer hetzelfde als in het eenvoudige model. Maar er zijn twee grote verschillen. Aangezien we met tijdsafhankelijke beweging te maken hebben moeten we de plaats van een deeltje kunnen onthouden. Hiertoe wordt er een nieuwe matrix aangemaakt, die hetzelfde werkt als de plaatsmatrix van de deeltjes, maar deze keer slaan we op in welke kolom, rij en laag het deeltje zich bevindt op het grid. Het tweede verschil is dat we de input van de deeltjes aan het oppervlak willen houden. Hiervoor moeten we definiëren hoe hoog het water staat op de locatie van input op het juiste tijdstip. Deze waterhoogte heeft nog een ander aandachtspuntje. We werken met 10 gelijke lagen met gelijke dikte, maar deze dikte varieert. We moeten dus op elk tijdstip bepalen hoe dik een laag is, om te kijken in welke laag een deeltje zich bevindt.

Het tweede deel van het model bestaat uit het algoritme dat de plaats van de deeltjes bepaalt. Het algoritme gaat hetzelfde als bij het eenvoudige model, alleen worden de juiste snelheden en waterhoogten nu per tijdstip per locatie uit de bestanden gehaald. Ook de check van de randvoorwaarden verloopt op dezelfde manier. Ook worden hier de kolom, rij, en layer van de deeltjes per tijdstap weer opgeslagen.

In het derde deel worden de plaatsgegevens verwerkt in vectoren voor de x-, y- en z-richtingen, voor het genereren van de resultaten.

5.2.3 Het model achterwaarts

Voor het achterwaartse model gelden twee veranderingen ten opzichte van het voorwaartse model. Allereerst worden de snelheden uiteraard omgedraaid, net als in het eenvoudige model. Ten tweede moeten de tijdsafhankelijke bestanden juist andersom worden gebruikt, om zo ook de tijd om te kunnen draaien. Voor de code wordt verwezen naar bijlage (9.6).

5.2.4 Genereren resultaten

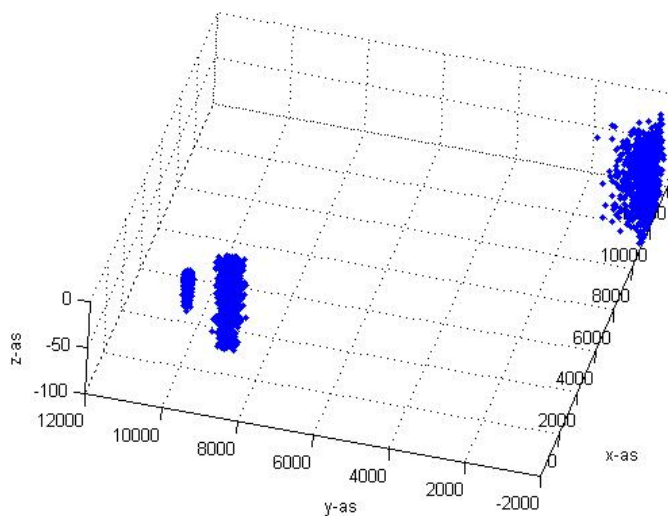
Ook het genereren van de resultaten bestaat uit drie delen. Allereerst volgen uit het model 3d-plots, boven- en zijaanzichten, scatterplots en scatterhistplots. Hiermee kan duidelijk worden aangegeven waar de deeltjes zich bevinden. Voor deze resultaten wordt gebruik gemaakt van de commando's `plot3`, `view`, `scatter`, `scatterhist`. Ten tweede worden de plaatsgegevens gebruikt voor het uiteindelijke doel, de risicokaarten. Hiervoor moet de kansdichtheid worden berekend. We slaan als het ware alles plat naar 2d. Dit kunnen we doen omdat we eigenlijk op zoek zijn naar oppervlakte resultaten. We tellen per punt in een gebiedje van 5 bij 5 meter om dit punt heen hoeveel deeltjes in dat gebiedje zitten. Dit getal kennen we toe aan het punt. Vervolgens delen we door de oppervlakte van het gebiedje en het totale aantal deeltjes om de kansdichtheid te bepalen. Van deze gegevens maken we een matrix. Deze matrix kunnen we gebruiken bij het maken van contourplots en een 3d-histogram. Hiervoor zijn de commando's `contour`, `bar3`. Tenslotte kan er nog een filmpje gemaakt worden van de resultaten. In dit filmpje wordt de verplaatsing van de deeltjeswolk geplot in het domein, inclusief variërende waterhoogte. Voor de code wordt u verwezen naar bijlagen (9.7) en (9.8).

Hoofdstuk 6

Resultaten

6.1 Eenvoudig model

Met het eenvoudige model kunnen we al een mooi inzicht krijgen van de verspreiding van een wolk deeltjes. In de figuur hieronder is de locatie op drie verschillende tijden $t = 100$, $t = 1000$ en $t = 10000$ weergegeven.

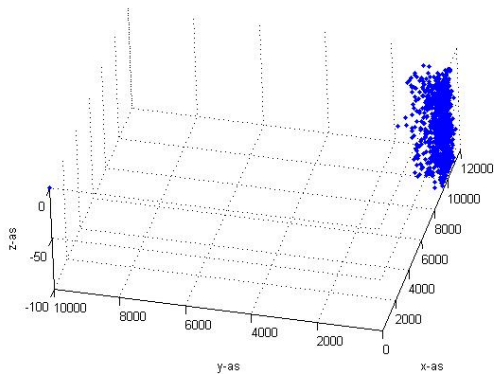


Figuur 6.1: Initiële input (0,10000,0)

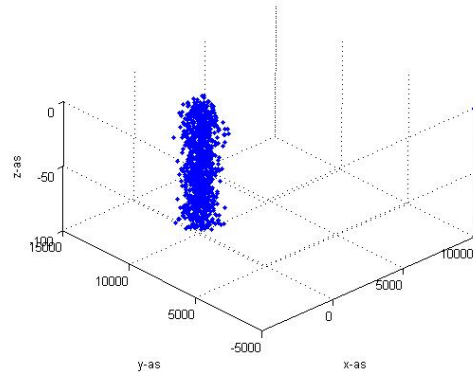
In de figuur kunnen we zien dat de deeltjeswolk zich uitbreidt, maar onder het zeeniveau blijft. Op het derde tijdstip heeft de wolk een rand bereikt. Hier komen de deeltjes dus als het ware land tegen en kunnen niet verder. De deeltjeswolk zal hier blijven hangen.

Ook kunnen we het model verifiëren door de volgende figuren te vergelijken. Het aantal gebruikte tijdstappen is 10000.

Uit de figuren blijkt inderdaad dat het achterwaartse model als resultaat de plaats van initiële input van het voorwaartse model als locatie aangeeft.



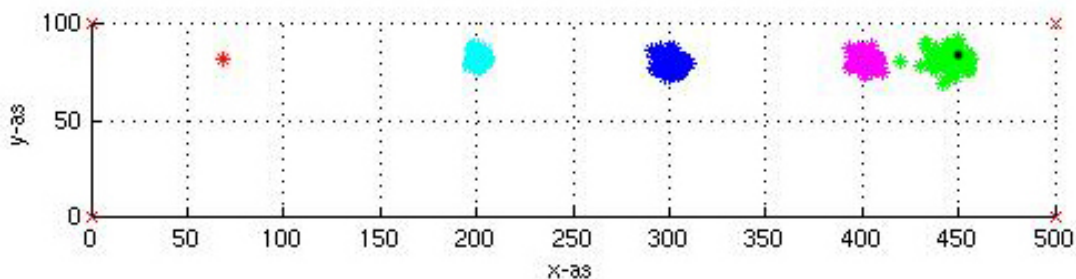
Figuur 6.2: Voorwaarts: Initiële input (0,10000,0)



Figuur 6.3: Achterwaarts: Vervuiling (10000, 0,0)

6.2 Testcase

Allereerst bekijken we een verificatie van het model. In onderstaande figuur zien we een deeltjeswolk zich verspreiden in de tijd. De massa input is op locatie (68, 82), dit is de plaats waar de kansdichtheid het hoogst is na 15 minuten terug in de tijd met het achterwaartse model, met een initiële input op locatie 450, 80. Deze locatie wordt ook weergegeven in de figuur, met een zwarte ster. De deeltjeswolk van het voorwaartse model bevindt zich na 15 minuten inderdaad ongeveer rond het zwarte sterretje.



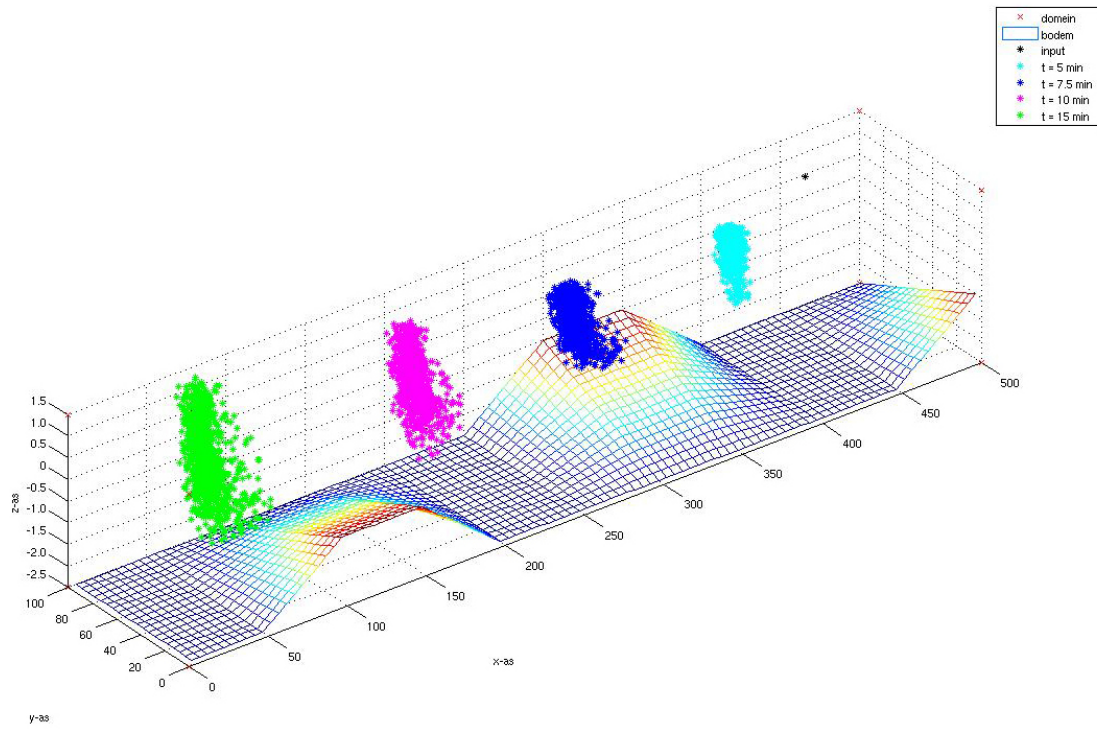
Figuur 6.4: Voorwaarts model voor verificatie

Vervolgens gaan we voor drie verschillende kritieke locaties kijken wat de resultaten zijn van het achterwaartse model. Deze kritieke locaties kunnen we voorstellen als plaatsen in de zee waar het van belang is dat daar geen vervuiling voorkomt. Ook kunnen we deze locaties voorstellen als plaatsen waar vervuiling is aangetroffen en we willen kijken waar deze vervuiling mogelijk vandaan is gekomen. In de figuren staan achtereenvolgens, een overzicht van de verspreiding van een deeltjeswolk op vier tijdstippen, namelijk 5; 7,5; 10 en 15 minuten terug in de tijd, door een 3dplot en aanzichten. Vervolgens komen er contourplots aan bod per tijdstip, een overzicht met de kritieke locatie en een vergroting van de wolk. De drie contouren zijn $\frac{1}{3}$ en $\frac{2}{3}$ van de maximale kansdichtheid en de minimale kansdichtheid. Tenslotte komen er nog een aantal figuren van de wolk na 15 minuten. Dit zijn een plot van de deeltjes, nog een plot van de deeltjes, maar nu inclusief histogrammen, een

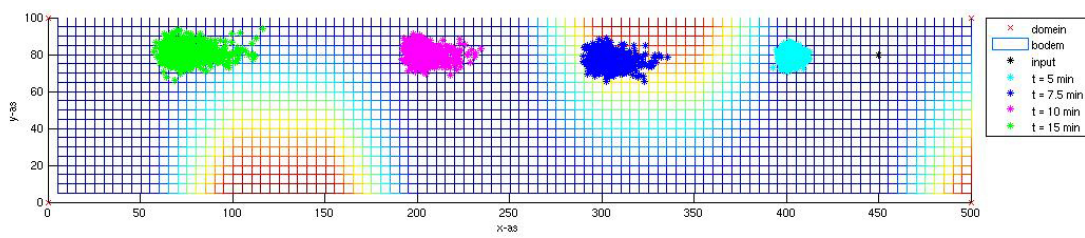
3d histogram van de kansdichtheid en tenslotte nog een 3d overzicht van alle tijdstippen. Er is gebruik gemaakt van 1000 deeltjes. Meer deeltjes zijn niet nodig om een resultaat te verkrijgen dat goed inzicht geeft in de verspreiding van de wolk.

6.3 Locatie: 450,80

6.3.1 3d Plots en aanzichten

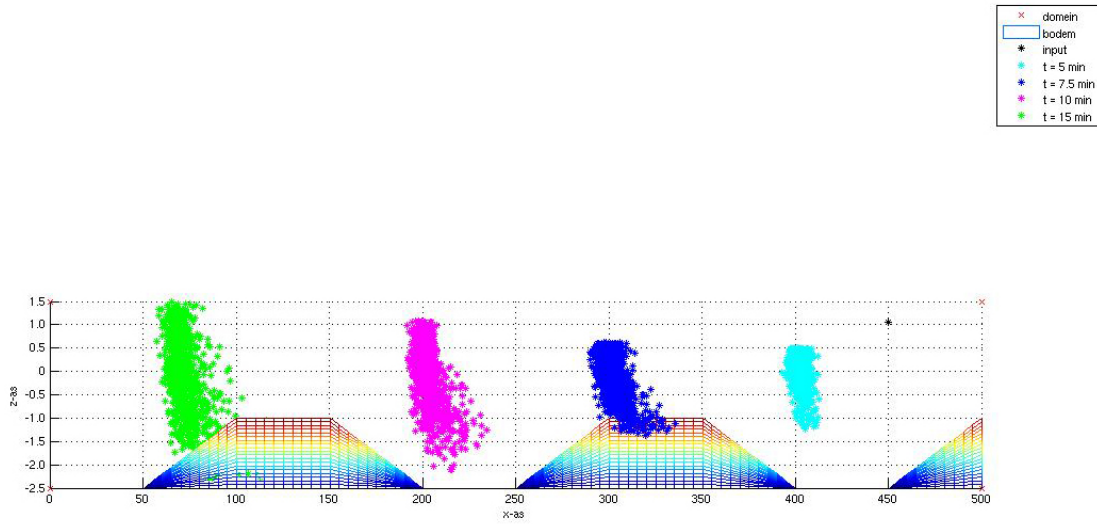


Figuur 6.5: 3d plot deeltjeswolk

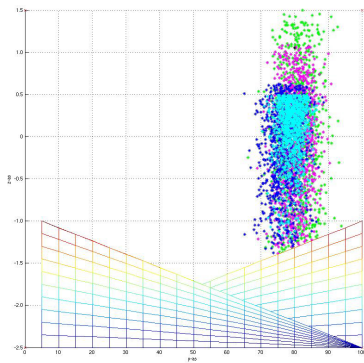


Figuur 6.6: Bovenaanzicht

6.3.2 3d Plots en aanzichten - vervolg

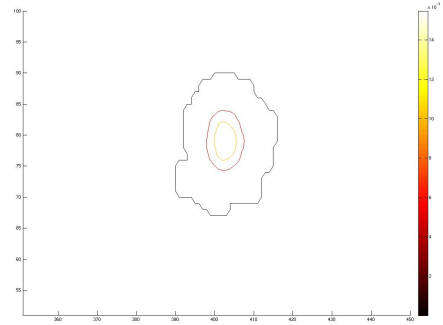
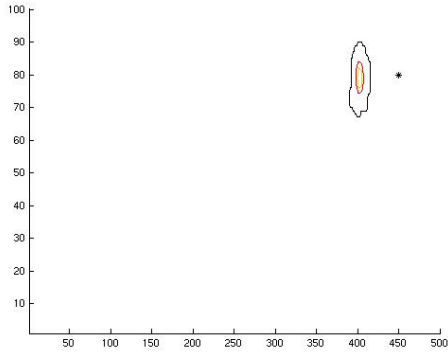


Figuur 6.7: Lengte-aanzicht

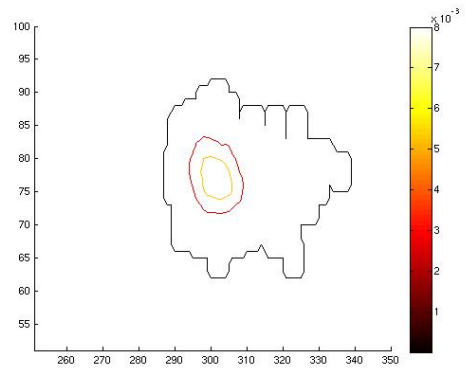
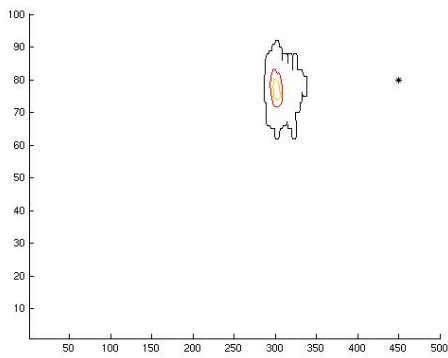


Figuur 6.8: Breedte-aanzicht

6.3.3 Contourplots

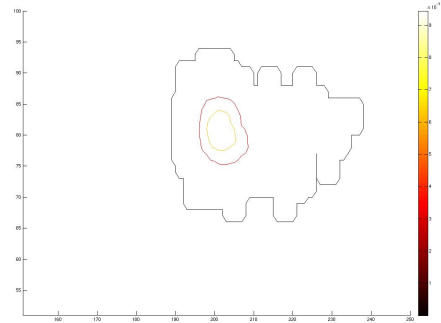
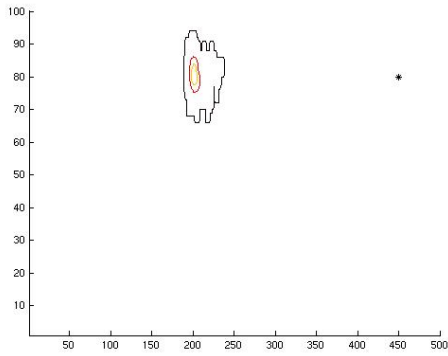


Figuur 6.9: $t = 5$ min.

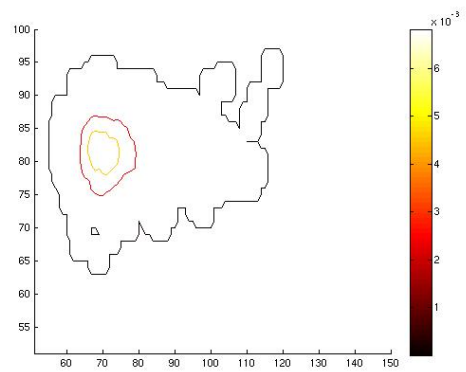
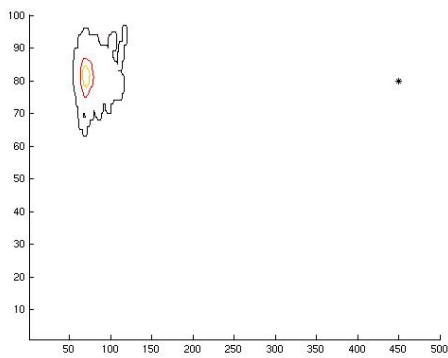


Figuur 6.10: $t = 7.5$ min.

6.3.4 Contourplots - vervolg

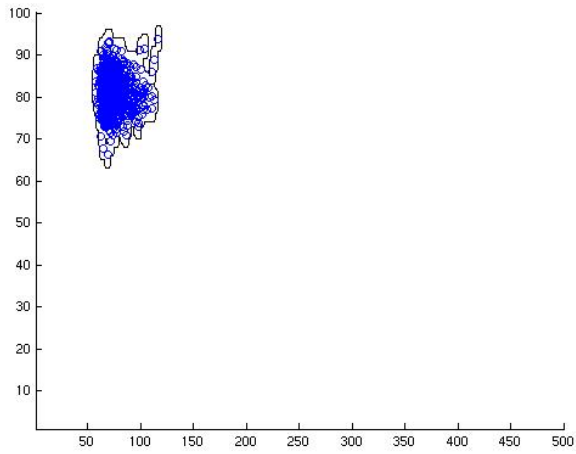


Figuur 6.11: $t = 10$ min.

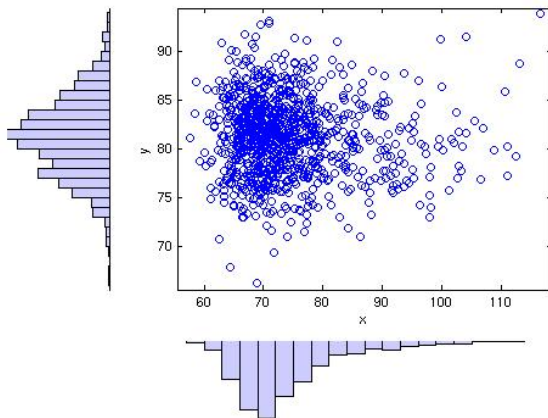


Figuur 6.12: $t = 15$ min.

6.3.5 Overige resultaten

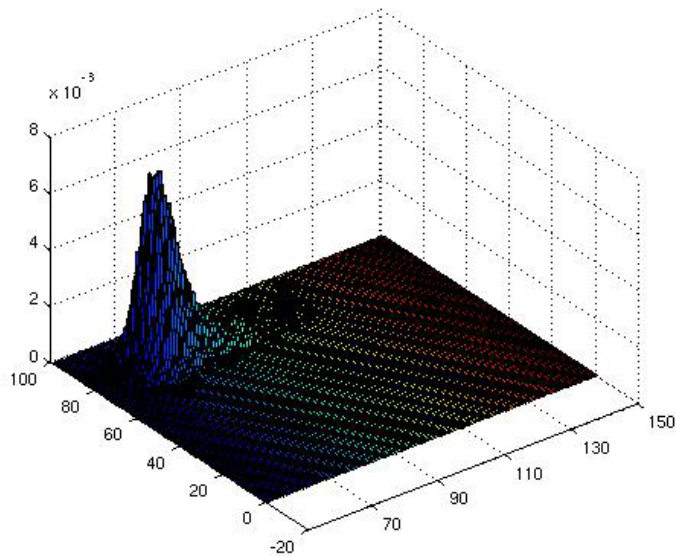


Figuur 6.13: Scatterplot t = 15 min

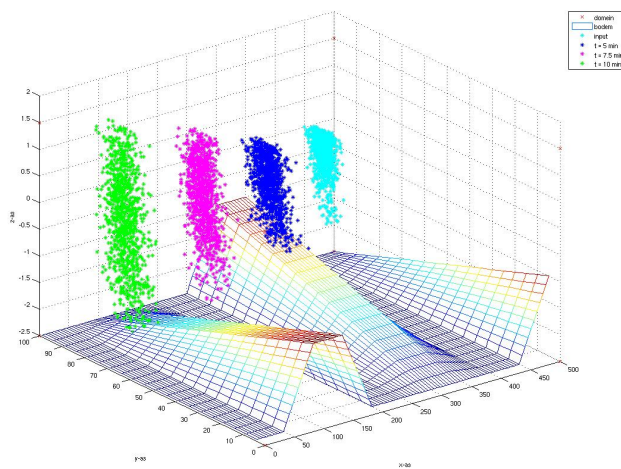


Figuur 6.14: Scatterhistogram t = 15 min

6.3.6 Overige resultaten- vervolg



Figuur 6.15: 3d Histogram t = 15 min

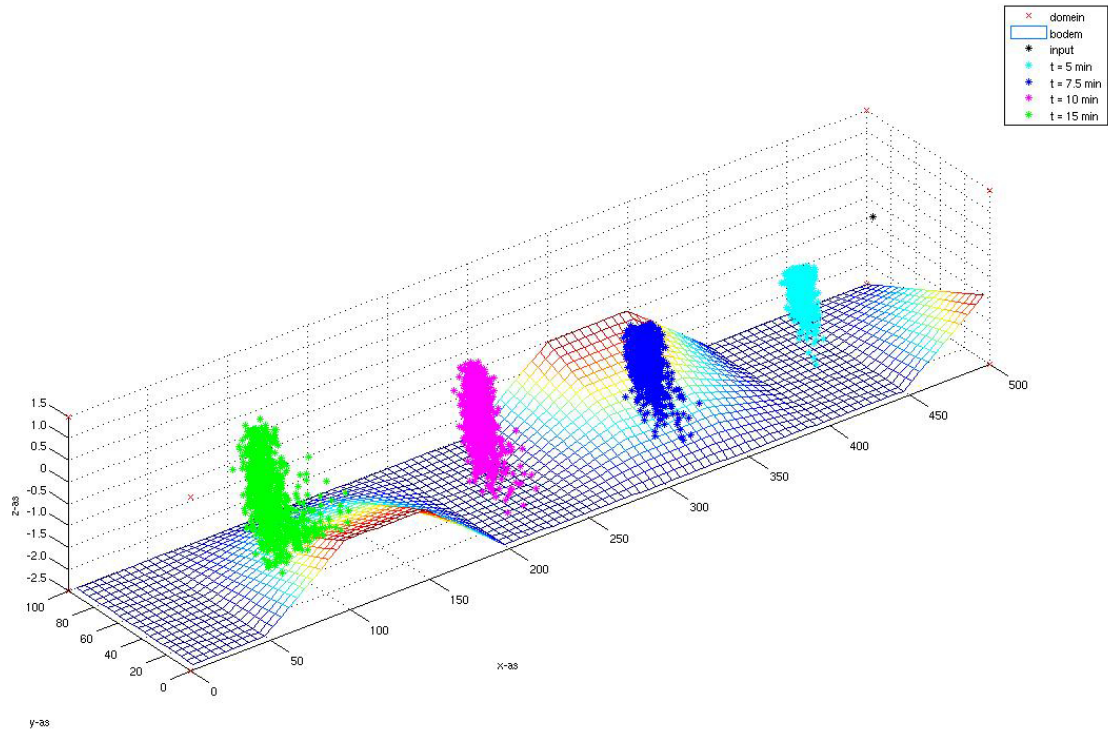


Figuur 6.16: 3d plot t = 15 min

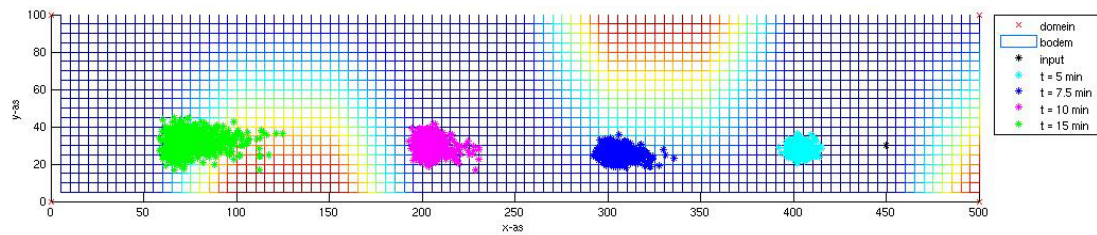
De grootste kansdichtheid aangetroffen was 0.0068 op locatie (68, 82).

6.4 Locatie: 450,30

6.4.1 3d Plots en aanzichten

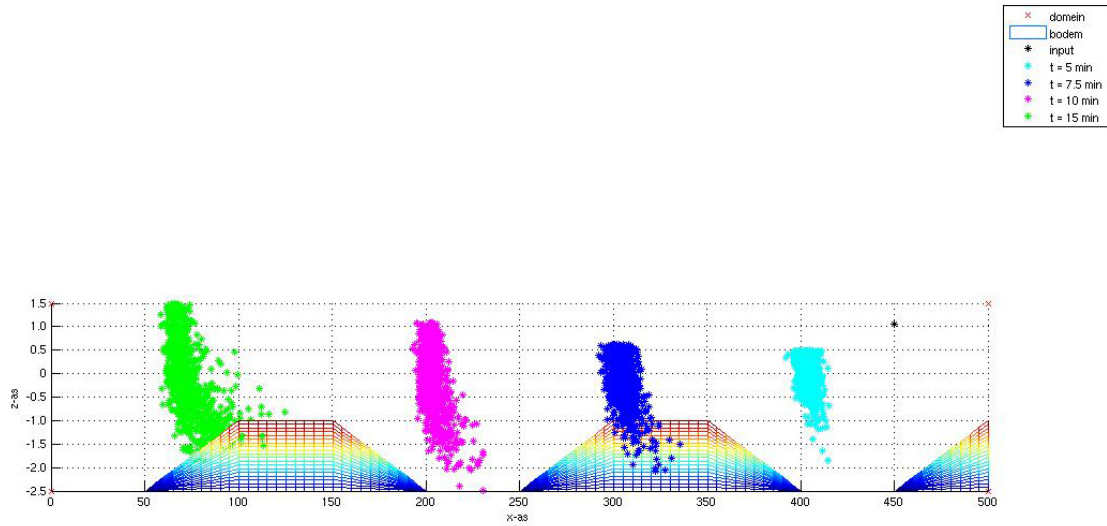


Figuur 6.17: 3d plot deeltjeswolk

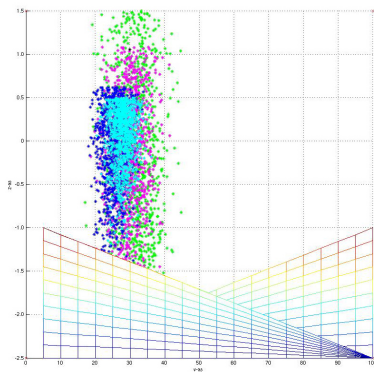


Figuur 6.18: Bovenaanzicht

6.4.2 3d Plots en aanzichten - vervolg

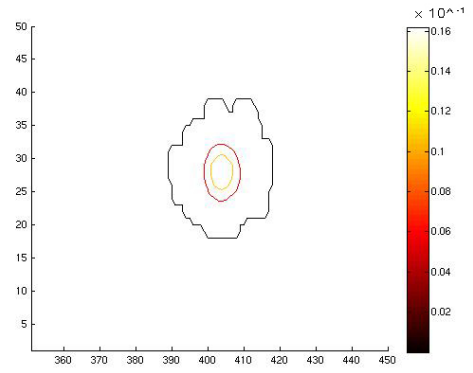
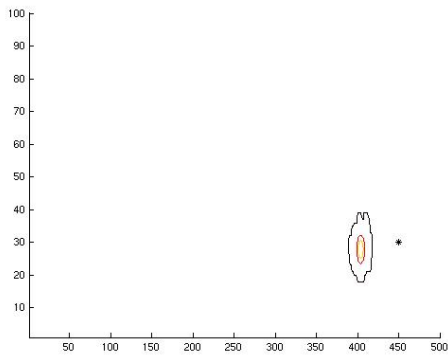


Figuur 6.19: Lengte-aanzicht

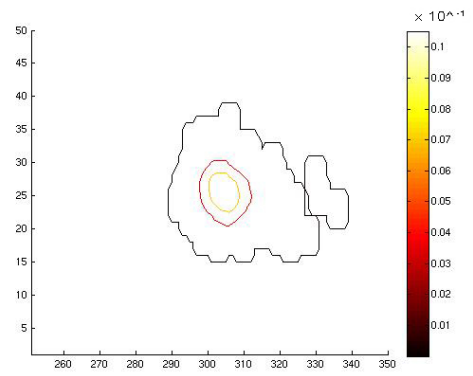
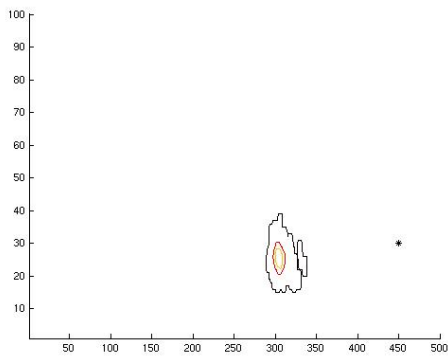


Figuur 6.20: Breedte-aanzicht

6.4.3 Contourplots

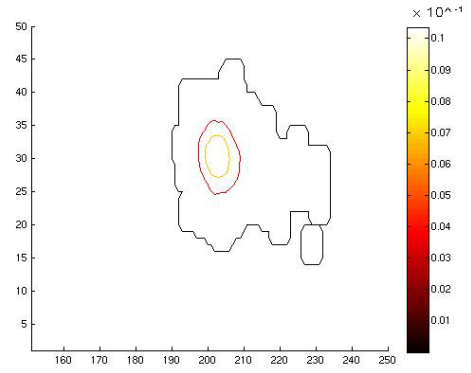
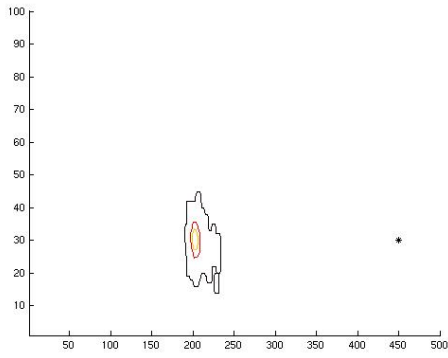


Figuur 6.21: $t = 5$ min.

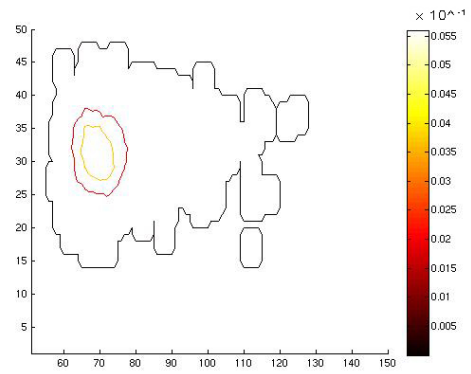
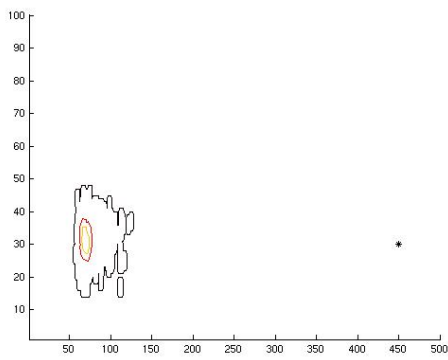


Figuur 6.22: $t = 7.5$ min.

6.4.4 Contourplots - vervolg

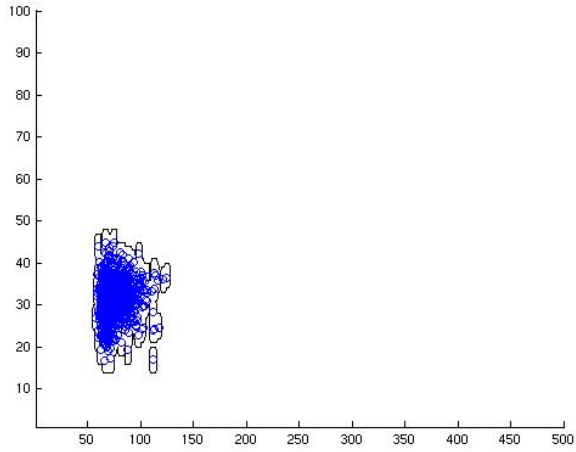


Figuur 6.23: $t = 10$ min.

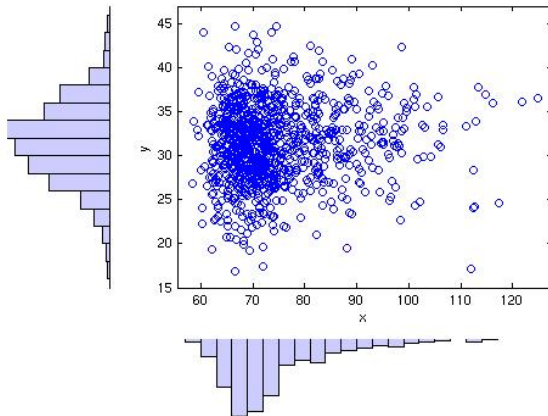


Figuur 6.24: $t = 15$ min.

6.4.5 Overige resultaten

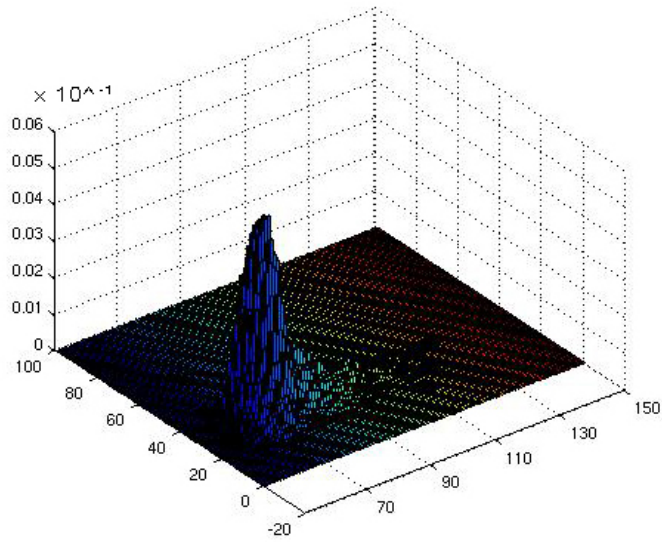


Figuur 6.25: Scatterplot t = 15 min

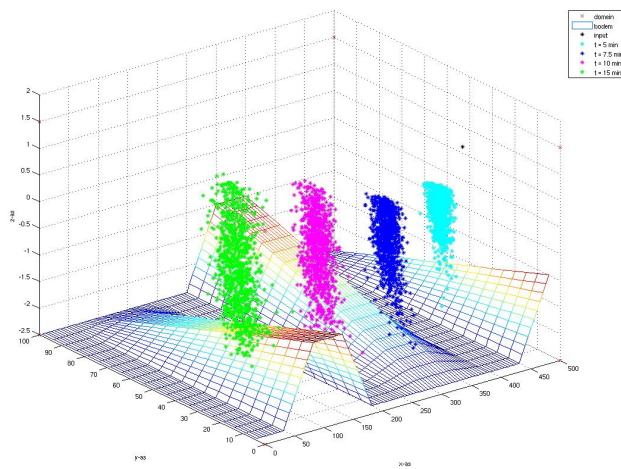


Figuur 6.26: Scatterhistogram t = 15 min

6.4.6 Overige resultaten- vervolg



Figuur 6.27: 3d Histogram t = 15 min

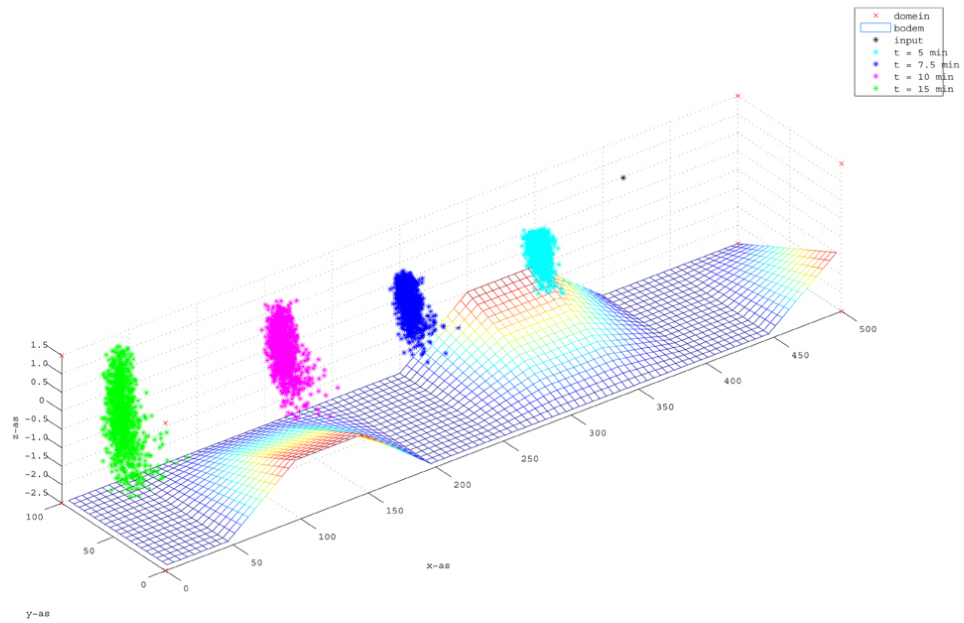


Figuur 6.28: 3d plot t = 15 min

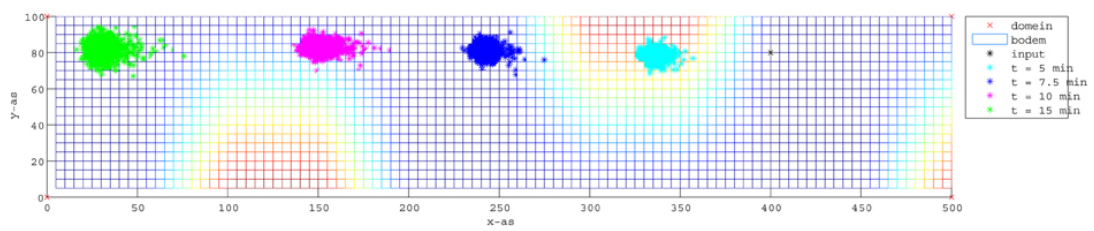
De grootste kansdichtheid aangetroffen was 0.0056 op locatie (70, 31).

6.5 Locatie: 400,80

6.5.1 3d Plots en aanzichten

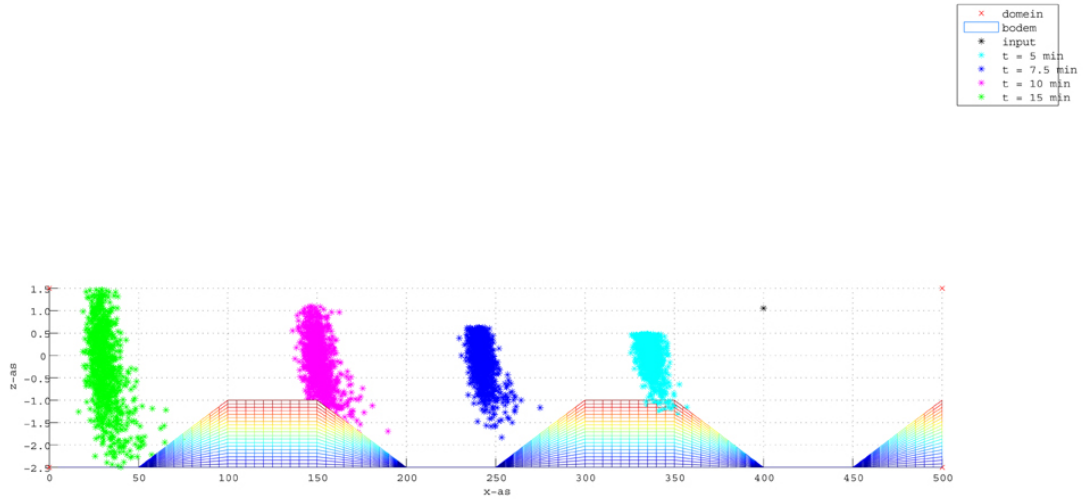


Figuur 6.29: 3d plot deeltjeswolk

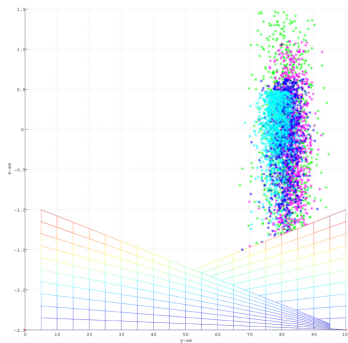


Figuur 6.30: Bovenaanzicht

6.5.2 3d Plots en aanzichten - vervolg

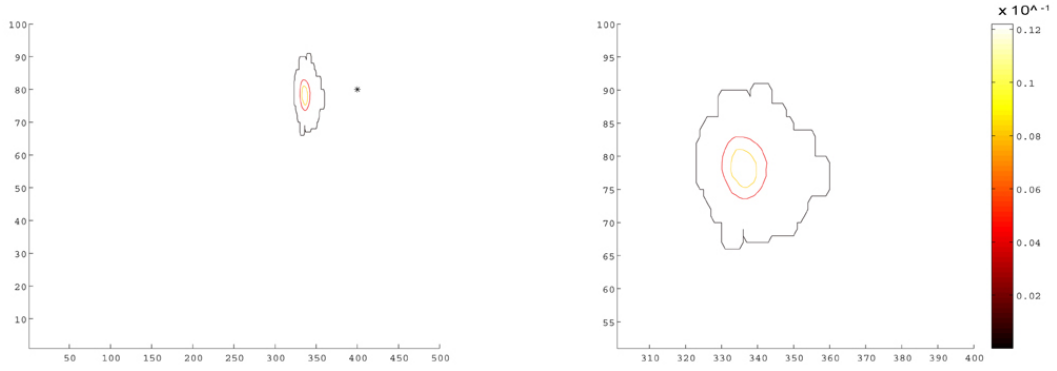


Figuur 6.31: Lengte-aanzicht

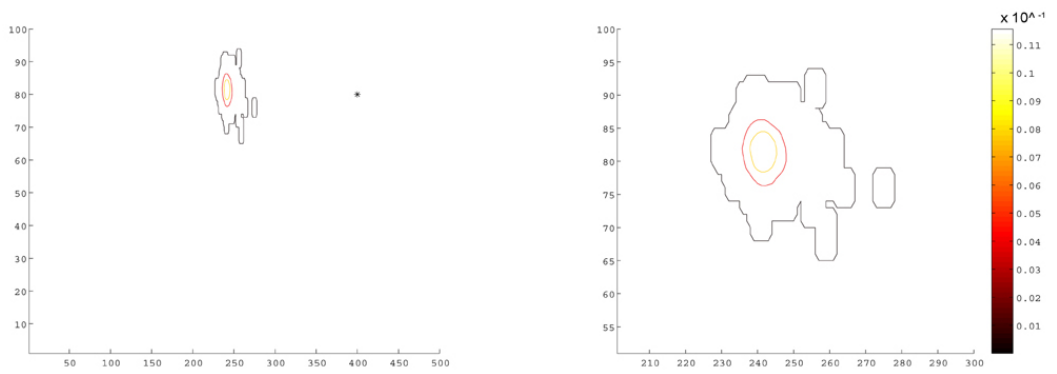


Figuur 6.32: Breedte-aanzicht

6.5.3 Contourplots

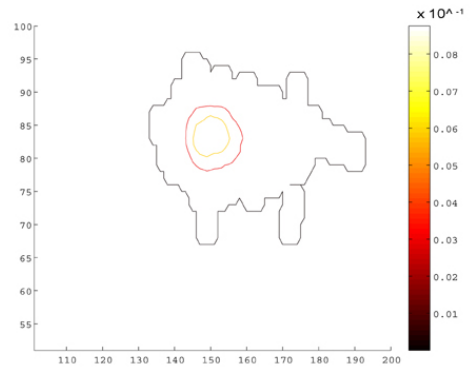
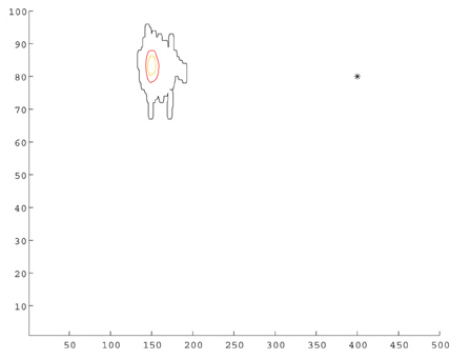


Figuur 6.33: $t = 5$ min.

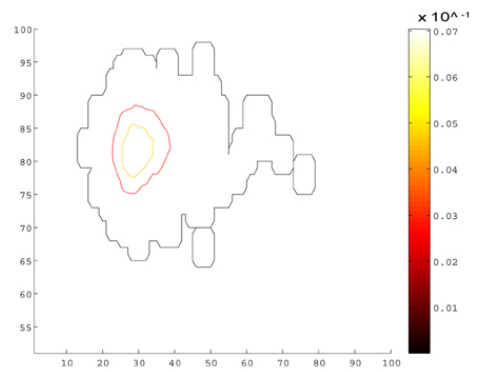
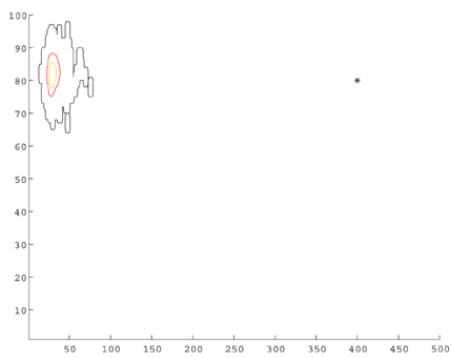


Figuur 6.34: $t = 7.5$ min.

6.5.4 Contourplots - vervolg

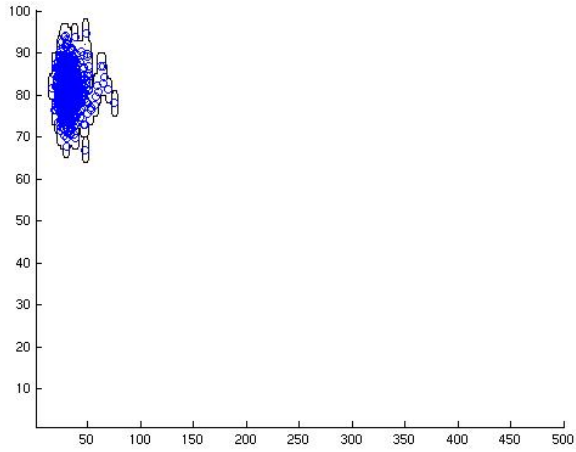


Figuur 6.35: $t = 10$ min.

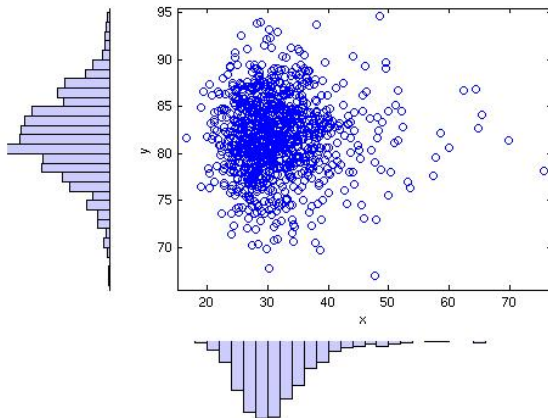


Figuur 6.36: $t = 15$ min.

6.5.5 Overige resultaten

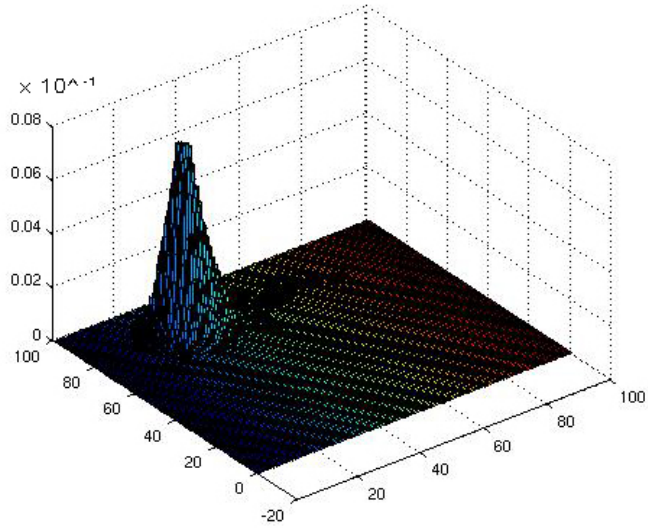


Figuur 6.37: Scatterplot $t = 15$ min

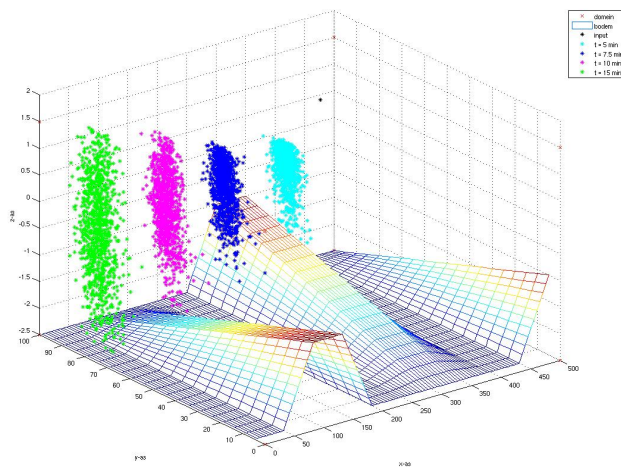


Figuur 6.38: Scatterhistogram $t = 15$ min

6.5.6 Overige resultaten- vervolg



Figuur 6.39: 3d Histogram t = 15 min



Figuur 6.40: 3d plot t = 15 min

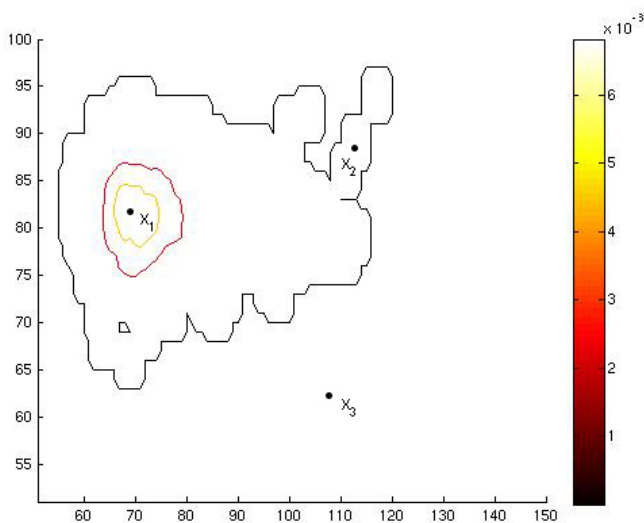
De grootste kansdichtheid aangetroffen was 0.0070 op locatie (28, 82).

6.6 Vergelijken resultaten

Bij het vergelijken van de resultaten kunnen we een aantal dingen concluderen. Allereerst zien we dat er bijna geen verplaatsing is dankzij stroming in de breedte van de rivier. De deeltjeswolken bewegen zich mee met de golfbeweging van het water. Zodra de wolk zich over een heuvel moet verplaatsen beginnen er wat deeltjes achterop te raken. Hierdoor zien we verschil in de vorm van de deeltjeswolken als we de verschillende locaties met elkaar vergelijken. Ook zien we dat de deeltjeswolken zich in de eerste tien minuten veel sneller verplaatsen dan in de laatste vijf minuten. Een laatste punt dat opvalt, is dat de wolk zich het liefst zo snel mogelijk over heel de verticale richting verspreidt.

6.7 Risicomap

Tenslotte lichten we een figuur nog extra toe. Dit is de contourplot van de kansdichtheid van de deeltjeswolk na vijftien minuten van de kritieke locatie (450, 80). Hieronder zijn in de figuur drie locaties aangegeven. Per locatie kunnen we iets zeggen over de gevolgen mocht er vervuiling op die locatie in het water geloosd worden. Als er vervuiling in locatie x_1 geloosd wordt, is de kans groot dat deze vervuiling na 15 minuten aankomt op onze kritieke locatie (450, 80). Als dit gebeurt in het punt x_2 dan is deze kans een stuk kleiner. Als het geloosd wordt in punt x_3 dan is de kans dat de vervuiling op onze kritieke locatie aankomt nihil.



Figuur 6.41: Risicomap voor de kritieke locatie (450, 80) voor $t = 15$ minuten

Hoofdstuk 7

Conclusie

In dit project is onderzocht hoe de verplaatsing van vervuiling (deeltjes) in een vloeistof te modelleren is in drie dimensies.

Allereerst is er een model opgesteld dat bestaat uit vier stappen.

1. Het advection-diffusie model dat de beweging beschrijft van deeltjes in een vloeistof, volgens:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (7.0.1)$$

2. Stochastische differentiaalvergelijkingen die dezelfde beweging van de deeltjes beschrijven, dankzij de Fokker-Planck vergelijking.
3. Het gediscretiseerde model met behulp van Euler volgens:

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t + \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\beta_t \quad (7.0.2)$$

4. Dit voorwaartse model kunnen we herschrijven als een achterwaarts model door de tijd en de snelheid om te draaien, dankzij de Kolmogorov-backward vergelijking. Hierdoor moeten we de resultaten interpreteren als kansen.

$$\frac{\partial C}{\partial t} - u \frac{\partial C}{\partial x} - v \frac{\partial C}{\partial y} - w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (7.0.3)$$

met

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t - \mathbf{u}\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\beta_t \quad (7.0.4)$$

Vergeet niet dat we terug in de tijd rekenen!

Vervolgens is dit model geïmplementeerd in Matlab. Uit de resultaten van de testcase kon er een risico map worden gemaakt voor de kritieke locatie (450, 80). Hieruit kan worden gehaald welke locaties gevaarlijk zijn voor onze kritieke locatie.

Het doel van het onderzoek was kijken of het modelleren in 3 dimensies de moeilijkheden die voorkomen bij het modelleren in 2 dimensies kon omzeilen. Het blijkt in twee dimensies moeilijk te zijn om rekening te houden met variaties in diepte en waterhoogte. Dit is goed gelukt. Het modelleren in 3 dimensies brengt weinig moeilijkheden met zich mee. De deeltjeswolk verspreidt zich als verwacht.

Hoofdstuk 8

Reflectie

In dit hoofdstuk kijk ik terug op het onderzoek, noem ik de leuke, interessante delen en wat me wat minder goed is bevallen. Ook geef ik aanbevelingen voor verder onderzoek.

Het leukste van het onderzoek was het feit dat ik bezig was met een daadwerkelijk bestaand probleem, het modelleren van de verspreiding van vervuiling in water. Een onderwerp dat mij interesseert. Ook het programmeren zelf vond ik erg leuk. Het interessante aan het onderzoek vond ik de koppeling tussen het advection-diffusie model en het deeltjesmodel en de manier waarop je het voorwaartse model kan omschrijven naar het achterwaartse model door alleen de tijd en de snelheid om te draaien. Wat mij minder goed is bevallen is dat het onderzoek soms maar heel langzaam vorderde en dat ik het moest combineren met nog drie vakken, waardoor ik me minder in het onderwerp heb kunnen verdiepen als ik had gewild.

Voor verder onderzoek draag ik aan te kijken naar de randen. Hier gebeuren nog wat rare dingen. Dit kan zeker met de gegevens te maken hebben, want bijvoorbeeld aan de lengteranden geven de waterhoogtegegevens de waarde nul. Verder werkt SIMONA met een bepaald grid, waardoor de snelheden, diepte en hoogte waarden niet precies op dezelfde plaats worden aangegeven. Deze gegevens kunnen nog worden geïnterpoleerd, wat ik niet heb gedaan. Ik heb al de waarden aangenomen alsof ze op hetzelfde punt zijn gedefinieerd. En natuurlijk kan het model verder worden aangepast om op een echt bestaand domein te worden toegepast.

Bibliografie

- [1] EINSTEIN, A., PH.D., *Investigations on the theory of the Brownian Movement*. (Dover Publications INC., 1956)
- [2] FISHER, H.B., *MIXING in Inland and Coastal Waters*. (Academic Press, Londen, 1979)
- [3] NAIFAR, F., *A Finite Volume Solver for the Simulation of Transport Processes*. ([Optima] Grafische Communicatie, Rotterdam, 2006)
- [4] SPIVAKOVSKA, D., *Reverse-time Diffusion in Environmental Models*. (Optima Grafische Communicatie, Rotterdam, 2007)
- [5] STIJNEN, J.W., *Numerical Methods for Stochastic Environmental Models*. (V.d. Berg, Kampen, 2002)
- [6] UFFINK, G.J.M., *Analysis of Dispersion by the Random Walk Method*. (1990)

Hoofdstuk 9

Bijlagen

9.1 Artikelen Greenpeace

9.1.1 De grootste olierampen in de geschiedenis

Acht van de tien olietankers is in slechte staat. Er zit vaak een slecht opgeleide bemanning op die slecht of helemaal niet wordt betaald. Gevolg: talloze olierampen. Ook bij olieplatforms gaat het soms mis. Bij ongelukken lekken jaarlijks honderdduizenden tonnen olie in zee. Hier volgt een overzicht van de grootste olierampen in de geschiedenis.

2003, 14 augustus. Voor de kust van Pakistan lekt de Griekse tanker 'Tasman Spirit' 15.000 ton olie. Het is de grootste olieramp die het land ooit heeft gekend. Kustbewoners raken ernstig ziek en het ecosysteem dreigt verloren te gaan.

2002, 19 november. Voor de kust van Spanje is de tanker 'Prestige' in twee stukken gebroken en gezonken. Het schip vervoert 77.000 ton olie, bijna twee maal zoveel als de Exxon Valdez in 1989.

2001, maart. Het olieproductieplatform de P-36 van het Braziliaanse oliebedrijf Petrobras, zinkt na een serie explosies waarbij 10 doden vallen. 1,5 miljoen liter olie in het platform sijpelt weg. Een olievlek van 20 bij 20 kilometer drijft in zee voor de kust van Brazilië.

2001, 16 januari: Voor de Galapagos-eilanden slaat de tanker Jessica lek. 900 ton stookolie komt in zee terecht. Een grote milieuramp dreigt. De olie kan schade toebrengen aan de bijzondere flora en fauna van dit (beschermd) deel van Ecuador. Dankzij de windrichting drijft de olie langs de eilandenkust en spoelt gelukkig niet aan.

2000, juni. De Panamese tanker Treasure zinkt in de buurt van Kaapstad. De 400 ton olie overspoelt Robbeneiland en Dasseneiland waar 150.000 pinguïns broeden.

1999, december: Voor de Franse kust slaat de op Malta geregistreerde tanker Erika lek op een rots. Zo'n 30.000 ton ruwe olie stroomt weg; de Franse stranden raken over een lengte van 200 kilometer vervuild. Maar liefst 300.000 zeevogels sterven.

1997: De tanker Nakodna lekt 20.000 ton olie in de Japanse Zee.

1997: De Diamond Grace lekt in de Baai van Tokio 15.000 ton olie.

1996, februari: Uit de Liberiaanse tanker Sea Empress stroomt 80.000 ton olie weg, nadat het schip voor Wales op een rots loopt. Een grote olievlek vervuilt de eilanden Skomer en Skokholm. Ongeveer 25.000 zeevogels komen om.

1993, januari: Bij de Britse Shetland-eilanden loopt de Liberiaanse olietanker Braer op een rots en slaat lek. Er loopt minstens 85.000 ton olie in zee. De olie wordt door de zware storm door het gebied verspreid.

1992, december: De Griekse tanker Aegean Sea breekt voor de Spaanse kust in tweeën en ontploft. Uit het schip stroomt 72.000 ton olie weg. Duizenden vogels komen om. De Galicische kust wordt over een lengte van 200 kilometer vervuild. Voor de 'Kust des Doods' zoals het gebied wordt genoemd vergingen in tien jaar 240 grote en kleine schepen. Zie ook de Urquiola, 1976.

1992: De Katina P lekt bij Maputo voor de kust van Mozambique 72.000 ton olie.

1991: Olie op de kusten rond de Perzische Golf tijdens de Golfoorlog: 1.470.000 ton.

1991. De ABT Summer verliest 260.000 ton olie voor de kust van Angola.

1991: Bij Genua lekt 50.000 van de 140.000 ton olie afkomstig van de Haven in zee na een explosie.

1991: De Griekse tanker Kirki verliest haar boeg en 20.000 ton olie voor de westkust van Australië.

1989, januari: olieramp op Antarctica. Het Argentijnse schip Bahia Paraiso loopt op een rif en verliest 680 ton olie. Duizenden pinguïns, aalscholvers en andere zeevogels sterven.

1989, januari: In de baai 'Prince William Sound' in Alaska loopt de Amerikaanse tanker Exxon Valdez op een rif. Ruim 36.000 ton ruwe olie stroomt weg en veroorzaakt de grootste milieuramp in de Amerikaanse geschiedenis. Bijna 600.000 otters, zeevogels, zeeleeuwen, grijze walvissen en andere dieren sterven.

1989: De Kharg 5 verliest 70.000 ton olie ten westen van Marokko.

1988: De Odyssey lekt 132.000 ton olie in zee ten oosten van Nova Scotia, Canada.

1988: De Roemeense tanker Borcea verliest een oliespoor langs de Nederlandse kust. Duizenden zeevogels sterven.

1985: De Nova lekt 70.000 ton olie in de Perzische golf bij Iran.

1983: De Assimi verliest 53.000 ton olie bij Oman.

1983: Voor de kust van Zuid-Afrika verliest de Castillo de Beliver in de Baai van Saldanha 50.000 ton olie.

1981, november: De in Gibraltar geregistreerde tanker Globe Assimi loopt bij Litouwen aan de grond en breekt in tweeën. Tienduizenden vogels worden slachtoffer. De stranden blijven vier maanden besmeurd met olie.

1979: Bij Tobago botsen Aegean Captain en Atlantic Empress en lekt de Atlantic Empress 257.000 ton olie in zee. Het is de grootste ramp tot dan toe.

1979: De Independenta verliest 93.000 ton olie in de Bosporus bij Turkije.

1979: Explosie van de oliebron Ixtoc: 610.000 ton olie in zee.

1979: De Griekse tanker Andros Patria explodeert bij de Noord Spaanse kust.

1978, maart. Voor de kust van Bretagne loopt de Liberiaanse tanker Amoco Cadiz vast en breekt in tweeën. De complete lading van 228.000 ton komt in zee terecht en vervuilt 360 kilometer Bretonse kust. Zo'n 15.000 zeevogels sterven. Visserij en toerisme lopen grote schade op.

1977: De Hawaiian Patriot lekt 300 mijl buiten Honolulu ruim 100.000 ton olie.

1976: Voor de Spaanse kust bij La Coruna verliest de Urquiola 108.000 ton olie. Bij het binnenlopen in de haven van La Coruna raakt het schip de rotsen, het keert terug naar zee terwijl de olie lekt en explodeert daar.

1976: De Scorpio verliest 31.000 ton olie voor de oostkust van Mexico.

1976: De Ellen Conway verliest 31.000 ton olie voor de kust van Algerije.

1976: De Argo Merchant lekt 28.000 ton olie voor de oostkust van de VS.

1975: De Jakob Maersk verliest bij de Portugese haven Porto 41.000 ton olie.

1975: De Epic Colotronis verliest bij de Dominicaanse Republiek 58.000 ton olie.

1974, augustus: De Nederlandse tanker Metula loopt bij Vuurland, Zuid-Chili, aan de grond. Zo'n 53.000 ton ruwe olie lekt weg en vervuult 150 kilometer kust. Ongeveer 40.000 pinguïns en aalscholvers sterven.

1973: De Napier verliest 67.000 ton olie voor de Chileense kust.

1972: De tanker Sea Star verliest 123.000 ton olie in de Golf van Oman.

1971: De Wafra, verliest bij Kaap Magelhaes in Zuid-Afrika. 62.000 ton olie.

1970: De tanker Antonio Lavalleya verliest 21.000 ton olie in zee bij Algerije.

1968: In Porto Rico verliest de Ocean Eagle 21.000 ton olie in zee.

1967: Ruim 119.000 ton olie belandt in zee bij Torrey Canyon. De kust van de Scilly Eilanden in Groot-Brittannië raakt vervuild met 24.000 ton olie.

Bron: www.greenpeace.nl

9.1.2 Transport van Olie

Vooraf tijdens het transport door pijpleidingen en in tankers treedt veel vervuiling op.

Lekkende pijpleidingen

Olie en vloeibaar gas gaan via pijpleidingen en enorme olietankers naar de kopers. De pijpleidingen roesten en lekken. Vooral in arme landen zijn ze er vaak slecht aan toe. Onderhoud is erg kostbaar. Het is veel goedkoper om een deel van de olie te verliezen dan om de lekken te repareren. In Rusland zijn kapotte pijpleidingen de oorzaak van gigantische lekkages.

De lokale bevolking betaalt de prijs van oliewinning. De omgeving wordt vervuild door lekkages en door uitstoot als de gelekke olie wordt verbrand. Voedselbronnen raken vervuild. De oude beroepen (vissen, jagen, veehouden) worden onmogelijk.

De olie lekkages in Rusland vervuilen de rivieren Ob, Yenisey, Lena en Volga. Jaarlijks komen via de Ob en de Yenisey duizenden tonnen olie in de Noordelijke IJszee terecht. De kwetsbare ecosystemen in het Arctische gebied hebben lange tijd nodig om zich te herstellen van olie lekkages. De mensen eten vis die naar olie smaakt. Kinderen spelen in oliewater. De drinkwatervoorziening is onbetrouwbaar en de levensverwachting van de oorspronkelijke bewoners van het Arctische gebied is sinds het begin van de olie- en gaswinning afgenomen van 61 naar 45 jaar (tussen 1959 en 1990).

Olietankers

Acht van de tien olietankers is in slechte staat. Er zit vaak ongeschoolde bemanning op die slecht of helemaal niet wordt betaald. Gevolg: talloze olierampen. Bij ongelukken lekken

jaarlijks honderdduizenden tonnen olie in zee. En dat is nog maar een kwart van de olie die in zee terecht komt.

De meeste vervuiling (75 procent) komt door lozingen van boorplatforms en olietankers. Sludge is een mengsel van smeerolie en water. Slobs zijn ladingresten uitgespoeld met water. Dat wordt op volle zee geloosd, legaal en illegaal. Schattingen gaan uit van maximaal anderhalf miljoen ton olie per jaar. Greenpeace vermoedt dat het veel meer is.

Kusten raken vervuild met olie. Vogels, vissen en zeedieren komen om in de smurrie.

De Internationale Maritieme Organisatie (IMO) stelt de regels voor de scheepvaart op. De 150 aangesloten landen controleren zelf of hun schepen zich aan de regels houden. De zogenaamde goedkope 'vlaggenstaten' zijn bij de IMO aangesloten maar controleren met opzet slecht, om meer scheepvaart aan te trekken. Daar gaat het mis.

Bron: www.greenpeace.nl

9.1.3 Vervuiling Oceanen

Naar schatting zal de wereldbevolking in 2050 uit 12 miljard mensen bestaan. Daarvan zal zo'n 60 procent binnen 60 km afstand van de zee leven. De druk op de vruchtbare kuststreken zal nog verder toenemen.

Vervuiling en de zee - als olie en water

Één belangrijke impact van menselijke activiteit op de oceanen is de zeewatervervuiling. Het is niet alleen de vervuiling door olie die afkomstig is van ongelukken en illegaal geloosd afval van tankreiniging.

Ondanks de duidelijke zichtbaarheid van olie-uitstroming op het zeemilieu, was de totale hoeveelheid in verband daarmee toch minimaal vergeleken met de vervuiling die van andere bronnen afkomstig is (inclusief huishoudelijke riolering, industriële lozingen, lekken vanaf vuilnisbelten, afvloeiing uit steden en de industrie, ongelukken, uitstroming, explosies, bedrijven die hun vuil in zee dumpen, olieproductie, mijnbouw, agrarische voedingsstoffen en bestrijdingsmiddelen, afvalwarmtebronnen, en radioactieve lozingen).

De op land gebaseerde bronnen zullen naar schatting verantwoordelijk zijn voor ongeveer 44 procent van de vervuilende stoffen die in zee terecht komen, en atmosferische toevoer is naar schatting verantwoordelijk voor 33 procent. Zeetransport is daarentegen slechts voor ongeveer 12 procent verantwoordelijk.

Dageraad van de dood: opkruipende dode gebieden (Creeping Dead Zones, CDZ)

De impact van vervuiling verschilt. Vervuiling door voedingsstoffen vanaf rioleringsuitstroming en de landbouw kan leiden tot lelijke en mogelijk gevaarlijke "bloei" van algen in het water langs de kust. Als deze bloei afsterft en vergaat, verbruiken zij de zuurstof in het water.

Dit heeft in sommige gebieden geleid tot opkruipende dode gebieden (Creeping Dead Zones, CDZ) waar de in het water opgeloste zuurstof daalde tot een niveau waarbij het leven in de zee niet kon voortbestaan. Industriële vervuiling vormt ook een bijdrage aan deze dode gebieden door het afscheiden van stoffen die, als zij verteren, ook de opgeloste zuurstof verbruiken

Ze gaan slijten

Radioactieve verontreiniging van de zee heeft vele oorzaken. Historisch gezien heeft het testen van atoomwapens er een bijdrage aan geleverd. De normale werking van nucleaire elektriciteitscentrales zorgt ook voor zeewatervervuiling, maar de allergrootste bron van door de mens vervaardigde radioactieve elementen in de zee zijn de nucleaire brandstofherverwerkingsfaciliteiten bij La Hague in Frankrijk en bij Sellafield in Groot-Brittannië.

Deze lozingen hebben geresulteerd in wijdverbreide verontreiniging van in zee levende hulpbronnen over een breed gebied; radioactieve elementen die te herleiden zijn tot deze herverwerking kunnen nog worden aangetroffen in zeewier bij de kust van West-Groenland en langs de kust van Noorwegen.

Zware metalen

De toevoer naar de oceanen van door de mens gemaakte chemicaliën betreft waarschijnlijk een enorm aantal verschillende stoffen. Men denkt dat over de hele wereld 63.000 verschillende chemicaliën in gebruik zijn. 3000 daarvan zijn verantwoordelijk voor 90 procent van de totale productie in tonnen. Elk jaar kunnen er tot 1000 nieuwe synthetische chemicaliën op de markt worden gebracht.

Van al deze chemicaliën vallen ongeveer 4500 in de ernstigste klasse. Deze zijn bekend als persistente organische vervuilende stoffen (Persistent Organic Pollutants, POP's). Ze zijn resistent tegen afbraak en kunnen zich in het weefsel van levende organismen ophopen (alles wat in zee leeft), kan hormoonstoringen veroorzaken die op hun beurt tot voortplantingsproblemen kunnen leiden, kanker teweegbrengen, het immuunsysteem onderdrukken en storingen veroorzaken in de normale ontwikkeling van kinderen.

POP's kunnen ook over lange afstanden in de atmosfeer worden getransporteerd en in koude gebieden worden afgezet. Als resultaat zijn de Inuits die op grote afstand van de bron van deze vervuiling in de poolstreek wonen, het ergst getroffen van alle mensen op de planeet, aangezien zij afhankelijk zijn van vetrijke voedingsmiddelen uit de zee zoals vis en zeehonden. POP's bestaan o.a. uit de zeer toxische dioxinen en PCB's (polychloorbifenylen) samen met diverse bestrijdingsmiddelen zoals DDT en dieldrin. Men denkt dat deze chemicaliën er ook verantwoordelijk voor zijn dat sommige ijsbeerpopulaties zich niet normaal voortplanten.

Eet u vanavond ook vis met POP's?

Het is griezelig dat de vis en visproducten die door mensen in een gematigd klimaat worden gegeten ook door POP's aangetast zijn. Bij vette vis hopen zich vaak POP's in het lichaam op en deze kunnen aan de menselijke consument worden doorgegeven. Als vette vis tot vismeel en visolie wordt verwerkt en vervolgens aan andere dieren wordt gevoerd, kan dit ook als een traject naar de mens werken.

Gekweekte vis en schaaldieren, melkvee, gevogelte en varkens worden in sommige landen allemaal met vismeel gevoerd en dus kunnen vlees en zuivelproducten evenals gekweekte en wilde vis nog meer bronnen van deze chemicaliën voor de mens vormen.

Mijnbouw

Spoormetaalvervuiling van de mijnbouw, productie en verwerking van metalen kunnen de gezondheid van zeeplanten en -dieren beschadigen en sommige vis en visproducten ongeschikt maken voor menselijke consumptie. De bijdrage door menselijke activiteiten

kan zeer aanzienlijk zijn: de hoeveelheid kwik die door industriële activiteiten in het milieu terechtgekomen is, bedraagt ongeveer vier maal de hoeveelheid die door natuurlijke processen zoals verwerking en erosie vrijkomt.

Olie

De meest zichtbare en de bekendste vorm van vervuiling is olievervuiling veroorzaakt door ongelukken met tankers en het uitspoelen van tanks op zee. Naast de afschuwelijke zichtbare impact op korte termijn, kunnen ook ernstige lange-termijn problemen veroorzaakt worden.

In het geval van de Exxon Valdez die in 1989 in Alaska aan de grond liep, kunnen biologische gevolgen van de olie-uitstroming 15 jaar na deze gebeurtenis nog worden geïdentificeerd. De Prestige, die aan het einde van 2002 bij de Spaanse kust verging, veroorzaakte enorme economische verliezen omdat hierdoor meer dan 100 stranden in Frankrijk en Spanje vervuild raakten waardoor in feite de plaatselijke visserijsector vernietigd werd.

Bron: www.greenpeace.nl

9.2 Artikelen vervuiling binnenland

9.2.1 Oude vervuiling Rijn blijkt 'tijdbom'

26 november 2004

ROTTERDAM - Oude vervuiling in de Rijn vormt door het warmere klimaat in West - Europa een ecologische tijdbom. Dat blijkt uit onderzoek dat twee Duitse universiteiten in opdracht van het Havenbedrijf Rotterdam hebben uitgevoerd.

De steeds vaker terugkerende hoosbuien en de toenemende stroom smeltwater uit de Zwitserse Alpen zorgen ervoor dat oude vervuiling in de bovenloop van de rivier wordt 'losgewoeld'. Daardoor komen flora en fauna in de Noord- en Waddenzee en langs de uiterwaarden van vooral de Waal versneld in de gevarenzone, aldus het onderzoek dat gisteren op een groot symposium in Venetië is gepresenteerd. Bovendien kan het Rotterdamse havenslib zo vervuild raken, dat dat alleen nog voor veel geld is op te ruimen.

De Duitse universiteiten van Hamburg-Harburg en Stuttgart hebben alle vervuilde locaties in de verkeersader naar Zwitserland en haar zijrivieren in kaart gebracht en de meest risicovolle plekken opgespoord.

Volgens projectleider T. Vellinga van het Havenbedrijf Rotterdam ligt de ernstigste vervuiling bij de stuw van Iffezheim in de boven-Rijn en in de Ruhr. Deze twee plekken vallen in de categorie 'hoog potentieel risico' voor de benedenloop bij Rotterdam. Voor de zijrivieren Neckar, Wupper en Lippe zijn ernstige vermoedens dat zij voor de Maasstad een risico kunnen vormen.

Het is voor het eerst dat de bodem van de verontreinigingen in het stroomgebied van de Rijn in beeld is gebracht. "De Duitsers kunnen er nu niet langer meer om heen dat zij iets aan de historische vervuiling moeten en kunnen doen. Hun argument, dat zij moeilijk alle rivieren en zijrivieren kunnen schoonmaken is met het onderzoek komen te vervallen", zei Vellinga in Venetië.

Rotterdam staat in de strijd tegen het aanpakken van de historische vervuilingen in de Rijn niet alleen. Ook de Nederlandse overheid en SedNet, een platform van wetenschappers en 'probleemeigenaren' dat zich inzet voor een Europese strijd tegen vervuilde bodems in de rivieren, hebben de problemen in Duitsland hoog op de agenda gezet.

Bron: www.waterbodem.nl

9.2.2 Vaten met xtc-afval in sloot gegooid

14 augustus 2007

ETTEN-LEUR/ZEVENBERGEN - De vondst van dertig vaten met gedumpt xtc-afval heeft afgelopen zaterdagmiddag voor behoorlijk wat consternatie gezorgd in natuurgebied De Berk, in de Zwartenbergse polder tussen in Etten-Leur en Zevenbergen.

Nadat de brandweer zaterdag om 12.39 uur een melding had gekregen van brandende vaten in een afwateringssloot aan de Langeweg, is er alles aan gedaan om te voorkomen dat de inhoud van de vaten, waarin zich vermoedelijk zoutzuur, salpeterzuur en het licht ontvlambare aceton bevond, zich via het water zou verspreiden.

Vanwege het brandgevaar en de schadelijke dampen die waren vrijgekomen, had de politie de weg afgezet. Om te voorkomen dat de chemische stoffen in de Leurse Vliet terecht zouden komen, werd de sloot door de brandweer over een lengte van 75 meter afgedamd. Volgens officier van dienst Cees van den Wijngaard is het gelukt om de vervuiling in te dammen, omdat het water in de sloot langzaam stroomde.' Het gealarmeerde waterschap Brabantse Delta, eigenaar van de sloot, schakelde meteen het gespecialiseerde bedrijf Wilchem BV uit Papendrecht in om de chemische stoffen te verwijderen. Medewerkers van het bedrijf, gekleed in beschermende pakken, voerden de vaten af en legden vervolgens het stuk sloot droog. Daarna werden de bodem en de slootwand afgegraven.

Volgens woordvoerder Peter van den Bosch van het Waterschap is er vervolgens weer schoon water toegelaten in de sloot. Van den Bosch: 'Dat wil niet zeggen dat de zaak nu veilig is. Er staan geen waarschuwingsborden, maar we raden het niet aan om de komende week in de sloot langs de Langeweg te vissen of vee te drenken.' De milieupolitie doet onderzoek naar de exacte inhoud van de vaten. De uitslag wordt over een week verwacht. Daarna neemt het Waterschap opnieuw monsters van het slootwater en de bodem om te controleren of alle stoffen verdwenen zijn.

Het Waterschap is ook zeer genteresseerd in het onderzoek naar de eventuele daders. Van den Bosch: 'Als eigenaar van de sloot zijn wij verantwoordelijk voor alle kosten die deze operatie met zich meebrengt. Die kosten willen wij verhalen op de daders.'

Bron: www.waterbodem.nl

9.2.3 Vervuiling in Hollandsche IJssel ontdekt

24 september 07

OUDERKERK - Het oppervlaktewater in de Hollandsche IJssel bij Gouderak is vervuild met bestrijdingsmiddelen. De verontreiniging is ontstaan door het saneren van de oever ter hoogte van de Zellingwijk.

Sommige werkzaamheden zijn vrijdagmiddag tijdelijk gestopt. Andere werkzaamheden, zoals het plaatsen van een damwand en baggeren van een haven kunnen gewoon doorgaan. Rijkswaterstaat gaat maanmorgen kijken wat er gedaan kan worden om verdere vervuiling van het water tegen te gaan.

Volgens Rijkswaterstaat is er geen sprake van veiligheidsrisico's. De Zellingwijk werd in 1986 afgebroken nadat er een ernstige bodemverontreiniging was geconstateerd. Het gebied wordt gesaneerd en opnieuw ingericht. Het project moet klaar zijn in 2010. Bron: Radio/TV West

Bron: www.rtvwest.nl

9.3 Artikelen vervuiling buitenland

9.3.1 Milieuramp dreigt in Zwarte Zee

11 november 2007

MOSKOU - Russische autoriteiten zijn maandag een grootscheepse zoektocht begonnen naar vermiste zeelieden op de Zwarte Zee, waar zeker vier vrachtschepen zonken en een olietanker in tweeën brak door zware storm.

Volgens het Russische persbureau Interfax zijn drie zeelieden om het leven gekomen en worden er nog zeker acht vermist. Meer dan 1300 ton stookolie is in zee gelopen. De Russen spreken van een milieuramp.

De olie van de tanker Volganeft 139 zal door het koude winterweer naar de bodem van de zee zakken en zich daar verder verspreiden. Het kan jaren duren voor het probleem is opgelost.

Waarschuwing

Russische autoriteiten meldden dat schippers waren gewaarschuwd voor de opkomende storm zondag, maar sommigen besloten deze waarschuwing te negeren. De meeste schepen kwamen in de problemen in de Straat van Kerch die de Zwarte Zee verbindt met de kleinere Azov-zee.

Zwavel

Niet ver van de rampplek zonk zondag ook een schip geladen met 2000 ton zwavel. De acht opvarenden konden worden gered.

Bron: www.nu.nl

9.3.2 Olieramp Rusland breidt zich uit

15 november 2007 18:18

MOSKOU - Ook dolfinen zijn inmiddels het slachtoffer van de olieramp die zich zondag voltrok op de Zwarte Zee.

Als er niet snel maatregelen genomen worden, raakt via de Straat van Kertsj ook de Zee van Azov ernstig vervuild, aldus een woordvoerder van de Russische milieuorganisatie Rosprirodnadzor donderdag. De dolfin in de Zwarte Zee wordt bedreigd met uitsterven.

Olie

Zeker 50 kilometer strand bij Port Kavkaz is bedekt met een dikke laag olie. Nog zeker 10.000 ton olieachtige smurrie moet opgeruimd worden. Volgens de woordvoerder drijft er nog ongeveer 1500 ton olie op het water. Zeker 30.000 vogels en 9000 vissen zijn al bezweken door de olieramp.

Afgelopen weekeinde zonken zeker vier vrachtschepen en brak een olietanker in tweeën op de Zwarte Zee tijdens een zware storm. Drie zeelieden zijn om het leven gekomen en negentien worden nog vermist.

Twistpunt

De Straat van Kertsj scheidt Rusland van de haven van Kersjt op het schiereiland de Krim in Oekrane. Het gebied is een twistpunt tussen de Russische en Oekraense autoriteiten, wat bestrijding van de olieramp niet ten goede komt.

Zo probeerden Oekraense milieudeskundigen Russische reddingswerkers te laten stoppen met het leegpompen van de gedeeltelijk gezonken tanker, aldus de woordvoerder van de Russische milieuorganisatie. Oekraense autoriteiten sloegen tevens een Russisch voorstel in de wind om de verspreiding van de olie te stoppen.

Strekdam

De onenigheid tussen beide landen is in 2003 ontstaan. Rusland begon toen vanaf zijn deel van de Zwarte Zee-kust aan de bouw van een strekdam naar het eilandje Tuzla. Oekrane reageerde woedend, omdat het eiland volgens Kiev op legale wijze in de Sovjettijd door Rusland aan Oekrane is 'overgedaan'.

Bron: www.nu.nl

9.3.3 Zuid-Korea kampt met olieramp

8 december 2007

SEOUL - Zuid-Korea kampt met de grootste olieramp in zijn geschiedenis doordat een tanker voor de westkust lek is geslagen.

In de buurt van een natuurreservaat spoelde zaterdag de eerste ruwe olie aan. Honderden vrijwilligers helpen mee de smurrie op te ruimen, melden de autoriteiten.

Botsing

Door een botsing tussen de mammoettanker Hebei Spirit en een ander schip liep ruim 10.000 ton olie in de Gele Zee. Dat is ongeveer een derde van de hoeveelheid die in 1989 in Alaska uit de Exxon Valdez stroomde.

De grootste olievlek is 13 kilometer lang en drijft in de richting van Mallipo Bay, 90 kilometer ten zuiden van de hoofdstad Seoul. Het duurt ongeveer nog een dag voordat deze vlek de kust bereikt, waar zich onder meer grote oesterbedden en visfarms bevinden.

Ecologische ramp

De autoriteiten zijn bang voor een ecologische ramp. De bedreigde kuststrook is een van de grootste wetlands van Azië. Het natuurreservaat is een belangrijke halteplaats voor trekvogels. Ook is de kust populair om zijn stranden.

Een grote drijvende dam en olievegers moeten voorkomen dat de olie zich verder verspreidt langs kust. De tanker ligt ruim 100 kilometer ten zuidwesten van Seoul voor anker in een gebied dat is aangewezen als een nationaal maritiem park.

Bron: www.nu.nl

9.3.4 Eerste dode vogels door olieramp Zuid-Korea

10 december 2007

AMSTERDAM - Op de Zuid-Koreaanse westkust spoelden maandag de eerste dode zeevogels aan, gedrenkt in de olie die in zee is gelopen nadat een tanker vrijdag door een werkschip was aangevaren.

In totaal liep er 10,5 miljoen ruwe olie in zee en milieuactivisten vrezen dat het gebied nog jaren de gevolgen van de milieuramp zal ondervinden.

Zo'n 8.800 vrijwilligers, kustbewoners, ambtenaren, politieagenten en soldaten waren maandag met scheppen en emmers op de stranden aan het werk om de olie op te ruimen, terwijl in zee personeel van de kustwacht, schippers en vissers op 138 schepen en in twee deden om zoveel mogelijk olie van de kust weg te houden.

Vakantiegangers

De Zuid-Koreaanse westkust wordt jaarlijks door miljoenen vakantiegangers bezocht en telt veel bedrijven die gespecialiseerd zijn in zeevoedsel. Ook komen er veel trekvogels. Bij het strand van Shinduri cirkelden maandag eenden boven zee die noch naar vis konden duiken, noch een plekje konden vinden om neer te strijken.

Een vogeldeskundige van de Zuid-Koreaanse milieudienst zei te verwachten dat de schadelijke gevolgen zo'n tien jaar te merken zullen zijn. Een collega wees erop dat het westelijke kustgebied grote moerasgebieden en Azië's belangrijkste rustplaats voor trekvogels omvat.

Ramp

De olie lekkage is al tot ramp verklaard, wat het de regionale overheden gemakkelijker maakt mensen en middelen te mobiliseren. De autoriteiten zeiden maandag te overwegen de kust tot "speciaal rampgebied" te roepen, wat directe hulp aan getroffen bedrijven als viskwekerijen, visrestaurants, hotels en andere toeristenaccommodaties mogelijk maakt.

Een brandweerman die op het strand van Mallipo in met olie besmeurde laarzen en oranje overall stond te zwoegen, zag weinig resultaat van zijn werk. "De olie en met olie besmeurde rommel blijft zich ophopen", verzuchtte hij.

Bron: www.nu.nl

9.4 Code eenvoudig model achterwaarts

%Bachelorproject Vervuilingsrisico's in Kustwateren

%Versie 2

%3-dim achterwaarts

clear all
clc

%Variabelen en constanten
Dxy=10;%Diffusiecoefficient

Dz=1;
vx=1; %Snelheid x-richting
vy=-1; %Snelheid y-richting
vz=0; %Snelheid z-richting
n=1000; %Aantal deeltjes
T=10000; %Aantal tijdstappen
dt=1; %Grootte tijdstap
dim=3; %Dimensie
randy1=0;
randzu=0;
randz1=-94;

P=zeros(dim*n,T);

for i=1:(dim*n)

%z-as
if mod(i,3)==0
P(i,1)=0;

%y-as
elseif mod(i,3)==2

P(i,1)=10000;

%x-as
else
P(i,1)=0;

end

end
plot3(P(1,1),P(2,1),P(3,1),'.')

grid ON
xlabel('x-as')
ylabel('y-as')
zlabel('z-as')
hold on

for i=1:(dim*n)

for j=2:T

if mod(i,3)==0

P(i,j)=P(i,j-1)+vz*dt+sqrt(2*Dz*dt)*randn(1);

if P(i,j)>=randz1
P(i,j)=P(i,j);

else
verschil=randz1-P(i,j);
P(i,j)=randz1+verschil;

end

if P(i,j)<=randzu
P(i,j)=P(i,j);

else
P(i,j)=-P(i,j);
if P(i,j)<=randz1
P(i,j)=P(i,j-1);
end

end

elseif mod(i,3)==2

P(i,j)=P(i,j-1)+vy*dt+sqrt(2*Dxy*dt)*randn(1);

if P(i,j)>=randy1

P(i,j)=P(i,j);

else

P(i,j)=-P(i,j);

end

else

P(i,j)=P(i,j-1)+vx*dt+sqrt(2*Dxy*dt)*randn(1);

end

end

if mod(i,100)==0

i

end

end

Px=zeros(1,n);

Py=zeros(1,n);

Pz=zeros(1,n);

t=100;

for i=1:n

Px(i)=P((3*i-2),t);

Py(i)=P((3*i-1),t);

Pz(i)=P((3*i),t);

end

plot3(Px,Py,Pz,'.')

hold on

Px=zeros(1,n);

Py=zeros(1,n);

Pz=zeros(1,n);

t=1000;

for i=1:n

Px(i)=P((3*i-2),t);

Py(i)=P((3*i-1),t);

Pz(i)=P((3*i),t);

end

plot3(Px,Py,Pz,'.')

Px=zeros(1,n);

Py=zeros(1,n);

Pz=zeros(1,n);

t=10000;

for i=1:n

Px(i)=P((3*i-2),t);

Py(i)=P((3*i-1),t);

Pz(i)=P((3*i),t);

end

plot3(Px,Py,Pz,'.')

9.5 Code Genereren gegevens

```
% RSDS
% runs RSDS on SDS-[name] and produces datafiles for given times
% arguments: <times> is a vector containing the times in minutes

function rsds(name, times)

format short

% create input for RSDS
f = fopen(sprintf('rsdsinp.%s', name), 'w');

fprintf(f, 'name=\''lgrid'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_lgrid.mat'\''\n', name);
fprintf(f, 'go\n');

% depth points
fprintf(f, 'name=\''xdep'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_xdep.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''xdep'\''');
fprintf(f, 'go\n');
fprintf(f, 'name=\''ydep'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_ydep.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''ydep'\''');
fprintf(f, 'go\n');

% depth values
fprintf(f, 'name=\''h'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_h.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''h'\''');
fprintf(f, 'go\n');

% horizontal velocity points
fprintf(f, 'name=\''xu'\''\n');

% WL points
fprintf(f, 'name=\''xzeta'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_xzeta.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''xzeta'\''');
fprintf(f, 'go\n');
fprintf(f, 'name=\''yzeta'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_yzeta.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''yzeta'\''');
fprintf(f, 'go\n');

% vertical velocity points
fprintf(f, 'name=\''xv'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_xv.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''xv'\''');
fprintf(f, 'go\n');
fprintf(f, 'name=\''yv'\''\n');
fprintf(f, 'matfile=\''s_yv.mat'\''\n', name);
fprintf(f, '\nmatname=\''yv'\''');
fprintf(f, 'go\n');

% water levels
fprintf(f, 'name=\''sep'\''\nmatlab');
for k=1:length(times)
    fprintf(f, '\nmatfile=\''s_sep_map_%d.mat'\''', name, round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\nmatname=\''sep_map_%d'\''', round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\ntime=%d\ngo', times(k));
end

% u-velocities
fprintf(f, '\nname=\''up'\''');
for k=1:length(times)
    fprintf(f, '\nmatfile=\''s_up_map_%d.mat'\''', name, round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\nmatname=\''up_map_%d'\''', round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\ntime=%d\ngo', times(k));
end

% v-velocities
fprintf(f, '\nname=\''vp'\''');
for k=1:length(times)
    fprintf(f, '\nmatfile=\''s_vp_map_%d.mat'\''', name, round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\nmatname=\''vp_map_%d'\''', round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\ntime=%d\ngo', times(k));
end

% w-velocities
fprintf(f, '\nname=\''w'\''');
for k=1:length(times)
    fprintf(f, '\nmatfile=\''s_w_map_%d.mat'\''', name, round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\nmatname=\''w_map_%d'\''', round(100*times(k)));
    fprintf(f, '\ntime=%d\ngo', times(k));
end

fclose(f);
system(sprintf('rsds.pl -back n -bufsize 10 -infile rsdsinp.%s -outfile rsdsout.%s -runid %s', name, name, name));
return
```

9.6 Code Testcase Achterwaarts

```

%Bachelorproject Vervuillingsrisico's in Kustwateren

%Versie 13
%3-dim achterwaarts

clear all
clc

format long g

imax=400;
for i=1:imax
load(['vbd3dhdif_sep_map_' num2str(i*5) '.mat'])
load(['vbd3dhdif_up_map_' num2str(i*5) '.mat'])
load(['vbd3dhdif_vp_map_' num2str(i*5) '.mat'])
load(['vbd3dhdif_w_map_' num2str(i*5) '.mat'])
end

load vbd3dhdif_xzeta.mat
load vbd3dhdif_yzeta.mat
load vbd3dhdif_xdep.mat
load vbd3dhdif_ydep.mat
load vbd3dhdif_h.mat

%Variabelen en constanten
Dxy=(0.01);%Diffusiecoefficient
Dz=(0.001);

n=1000;      %Aantal deeltjes
T=400;      %Aantal tijdstappen
dt=3;       %Grootte tijdstap
dim=3;      %Dimensie
randxu=500;
randxl=0;
randyu=100;
randyl=0;

%definieren bakje
a=[0 500 0 500 0 500 0 500];
b=[0 0 100 100 0 0 100 100];
c=[-2.5 -2.5 -2.5 -2.5 1.5 1.5 1.5 1.5];
plot3(a,b,c.*25,'rx');
hold on

%definieren ondergrond
diepte=zeros(20,100);
k=2;
for j=1:100
for i=1:20
diepte(i,j)=-1*h(k);

k=k+1;
end
end

xdiepte=zeros(20,100);
k=2;
for j=1:100
for i=1:20
xdiepte(i,j)=xdep(k);
k=k+1;
end
end

ydiepte=zeros(20,100);
k=2;
for j=1:100
for i=1:20
ydiepte(i,j)=ydep(k);
k=k+1;
end
end

mesh((xdiepte-2.5),(ydiepte-2.5),diepte.*25);

grid off
axis('equal')

P=zeros(dim*n,T);
Q=zeros(dim*n,T);

%definieren input massa

a=80; %y-as
b=450; %x-as

kolom=ceil(b/5);
if kolom==0
kolom=1;
end

rij=ceil(a/5);
if rij==0
rij=1;
end

c=sep_map_2000(1+(kolom-1)*20+rij); %z-as

for i=1:(dim*n)
%z-as
if mod(i,3)==0
P(i,1)=c;
layerdikte=(sep_map_2000(1+(kolom-1)*20+rij)+h(1+(kolom-1)*20+rij))/10;
Q(i,1)=ceil((P(i,j)-sep_map_2000(1+(kolom-1)*20+rij))*(-1/layerdikte));
if Q(i,1)==0
Q(i,1)=1;
end
%y-as
elseif mod(i,3)==2
P(i,1)=a;
Q(i,1)=rij;
%x-as
else
P(i,1)=b;
Q(i,1)=kolom;
end
end

plot3(P(1,1),P(2,1),P(3,1)*25,'k*')
xlabel('x-as')
ylabel('y-as')
zlabel('z-as')
hold on

for j=2:T
for i=1:(dim*n)

```

```

%z-richtung
    if mod(i,3)==0
        wsnelheiddummy=['w_map_' num2str(2000-(j-1)*5)];
        wsnelheid=eval(wsnelheiddummy);
        waterleveldummy=['sep_map_' num2str(2000-(j-1)*5)];
        waterlevel=eval(waterleveldummy);
        P(i,j)=P(i,j-1)+1*wsnelheid(Q(i,j-1)+(Q(i,j-1)-1)*2000+(Q(i-2,j-1)-1)*20+Q(i-1,j-1))*dt+sqrt(2*Dz*dt)*randn(1);
        if P(i,j)>(-1.*h(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))
            P(i,j)=P(i,j);
        else
            verschilz=(-1.*h(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))-P(i,j);
            P(i,j)=(-1.*h(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))+verschilz;
        end
        if P(i,j)<=waterlevel(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j))
            P(i,j)=P(i,j);
        else
            verschilzu=P(i,j)-(waterlevel(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)));
            P(i,j)=(waterlevel(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))-verschilzu;
        end
        if P(i,j)<=(-1.*h(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))
            P(i,j)=P(i,j-1);
        end
        end
        layerdikte=(waterlevel(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j))+h(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))/10;
        Q(i,j)=ceil((P(i,j)-waterlevel(1+(Q(i-2,j)-1)*20+Q(i-1,j)))*(-1/layerdikte));
        if Q(i,j)==0
            Q(i,j)=1;
        end
        end
        %y-richtung
    elseif mod(i,3)==2
        vsnelheiddummy=['vp_map_' num2str(2000-(j-1)*5)];
        vsnelheid=eval(vsnelheiddummy);
        P(i,j)=P(i,j-1)+1*vsnelheid(Q(i+1,j-1)+(Q(i+1,j-1)-1)*2000+(Q(i-1,j-1)-1)*20+Q(i,j-1))*dt+sqrt(2*Dxy*dt)*randn(1);
        if P(i,j)>randy1
            P(i,j)=P(i,j);
        else
            P(i,j)=-P(i,j);
        end
        if P(i,j)<=randyu
            P(i,j)=P(i,j);
        else
            verschily=P(i,j)-randyu;
            P(i,j)=randyu-verschily;
        end
        if P(i,j)<=randy1
            P(i,j)=P(i,j-1);
        end
        end
        Q(i,j)=ceil(P(i,j)/5);
        end
        %x-richtung
    else
        usnelheiddummy=['up_map_' num2str(2000-(j-1)*5)];
        usnelheid=eval(usnelheiddummy);
        P(i,j)=P(i,j-1)+1*usnelheid(Q(i+2,j-1)+(Q(i+2,j-1)-1)*2000+(Q(i,j-1)-1)*20+Q(i+1,j-1))*dt+sqrt(2*Dxy*dt)*randn(1);
        if P(i,j)>=randx1
            P(i,j)=P(i,j);
        else
            P(i,j)=-P(i,j);
        end
        if P(i,j)<=randxu
            P(i,j)=P(i,j);
        else
            verschilx=P(i,j)-randxu;
            P(i,j)=randxu-verschilx;
        end
        if P(i,j)<=randx1
            P(i,j)=P(i,j-1);
        end
        end
        Q(i,j)=ceil(P(i,j)/5);
        end
        end
        if mod(j,100)==0
            j
        end
    end

Px1=zeros(1,n);
Py1=zeros(1,n);
Pz1=zeros(1,n);

t=101;
for i=1:n
    Px1(i)=P((3*i-2),t);
    Py1(i)=P((3*i-1),t);
    Pz1(i)=P((3*i),t);
end

plot3(Px1, Py1, Pz1.*25, 'c*')
hold on

Px2=zeros(1,n);
Py2=zeros(1,n);
Pz2=zeros(1,n);

t=151;
for i=1:n
    Px2(i)=P((3*i-2),t);
    Py2(i)=P((3*i-1),t);
    Pz2(i)=P((3*i),t);
end

plot3(Px2, Py2, Pz2.*25, '*')

```

```

Px3=zeros(1,n);
Py3=zeros(1,n);
Pz3=zeros(1,n);

t=201;
for i=1:n
    Px3(i)=P((3*i-2),t);
    Py3(i)=P((3*i-1),t);
    Pz3(i)=P((3*i),t);
end

plot3(Px3, Py3, Pz3.*25, 'm*')

Px4=zeros(1,n);
Py4=zeros(1,n);
Pz4=zeros(1,n);

t=301;
for i=1:n
    Px4(i)=P((3*i-2),t);
    Py4(i)=P((3*i-1),t);
    Pz4(i)=P((3*i),t);
end

plot3(Px4, Py4, Pz4.*25, 'g*')

set(gca,'ZTick',-62.5:12.5:37.5)
set(gca,'ZTickLabel',{'-2.5','-2.0','-1.5','-1.0','-0.5','0','0.5','1.0','1.5'})

legend('domein','bodem','input','t = 5 min','t = 7.5 min','t = 10 min','t = 15 min')
grid on

```


9.7 Code Resultaten

```
Zmatrix=zeros(100,500);

for k=1:1000
    for j=1:500
    if Px4(k)<=j+2.5 & Px4(k)>j-2.5
        for i=1:100
            if Py4(k)<=i+2.5 & Py4(k)>i-2.5
                Zmatrix(i,j)=Zmatrix(i,j)+1/(1000*5*5);
            end
        end
    end
end
end

maximum=max(max(Zmatrix))

for j=1:500
for i=1:100
if Zmatrix(i,j)==maximum
i
j
end
end
end

hold on
[C,c] = contour(Zmatrix,[maximum,(2*maximum/3),(maximum/3),min(min(Zmatrix))]);
%plot(450,30,'k*')
colormap hot

scatter(Px4,Py4,50)

%set(c,'ShowText','on')

%scatterhist(Px,Py)

Zmatrixsub1=zeros(50,100);
for i=1:50
for j=1:100
Zmatrixsub1(i,j)=Zmatrix(i+50,j+50);
end
end

%contour(Zmatrixsub1,[maximum,(2*maximum/3),(maximum/3),min(min(Zmatrixsub1))])
%set(gca,'XTickLabel',{'360','370','380','390','400','410','420','430','440','450'})
%set(gca,'XTickLabel',{'260','270','280','290','300','310','320','330','340','350'})
%set(gca,'XTickLabel',{'160','170','180','190','200','210','220','230','240','250'})
%set(gca,'XTickLabel',{'60','70','80','90','100','110','120','130','140','150'})
%set(gca,'YTickLabel',{'55','60','65','70','75','80','85','90','95','100'})

%voor de bar

Zmatrixsub2=zeros(100,100);
for i=1:100
for j=1:100
Zmatrixsub2(101-i,j)=Zmatrix(i,j+50);
end
end

%bar3(Zmatrixsub)

set(gca,'XTickLabel',{'70','90','110','130','150'})
set(gca,'YTickLabel',{'100','80','60','40','20','0','-20'})
```

9.8 Code Filmpje

```
%definieren bakje
a=[0 500 0 500 0 500 0 500];
b=[0 0 100 100 0 0 100 100];
c=[-2.5 -2.5 -2.5 -2.5 2 2 2 2];

for m=1:50

plot3(a,b,c,'rx');
    hold on

%definieren ondergrond
diepte=zeros(20,100);
k=2;
for j=1:100
for i=1:20
diepte(i,j)=-1*h(k);
k=k+1;
end
end

xdiepte=zeros(20,100);
k=2;
for j=1:100
for i=1:20
xdiepte(i,j)=xdep(k);
k=k+1;
end
end

ydiepte=zeros(20,100);
k=2;
for j=1:100
for i=1:20
ydiepte(i,j)=ydep(k);
k=k+1;
end
end

mesh(xdiepte-2.5,(ydiepte-2.5),diepte);

waterhoogtedummy=['sep_map_' num2str(5*m) ];
waterhoogte=eval(waterhoogtedummy);

xzeta2=zeros(1,1800);
yzeta2=zeros(1,1800);
waterhoogte2=zeros(1,1800);
k=0;
for i=1:2001
if waterhoogte(i)==0
else
k=k+1;
xzeta2(k)=xzeta(i);
yzeta2(k)=yzeta(i);
waterhoogte2(k)=waterhoogte(i);
end
end
plot3(xzeta2-2.5,yzeta2-2.5,waterhoogte2,'.');

for i=1:n
    Px(i)=P( (3*i-2), (5*m) );
    Py(i)=P( (3*i-1), (5*m) );
    Pz(i)=P( (3*i), (5*m) );
end

plot3(Px, Py, Pz, 'g*');

M(m)=getframe;

hold off
end
movie(M,1)
```