



SRW2000

Standaard Raamwerk Water - versie 1.0

Analyse van Modellen

Blanco pagina.



SRW2000

**Standaard Raamwerk Water
- versie 1.0**

Analyse van Modellen

Projectteam SRW 2000

In opdracht van STOWA, ALTERRA, RIVM, RIZA

Oktober 2000

Bibliografie:

Tacke, J. (EDS International BV), Brinkman, R. (WL | Delft Hydraulics), Frieswijk, E. (EDS International BV), Levelt, D. (WL | Delft Hydraulics), Otjens, T. (Alterra), 2000, *SRW2000 Standaard Raamwerk Water – versie 1.0 Analyse van Modellen*, ISBN 90-5773-146-0, in opdracht van STOWA, rapport 2001-W-10, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, RIZA : Rijkswaterstaat – Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling / RIZA werkdocument 2001.129X, MX.systems rapport P4118-R-4, 51p.

Blanco pagina.

Voorwoord

Het project 'Standaard Raamwerk Water – Realisatie versie 1.0' wordt uitgevoerd in opdracht van STOWA (Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer) en medegefinancierd door Rijkswaterstaat – RIZA, RIVM en Alterra. Het consortium van opdrachtnemers bestaat uit IT-organisaties die actief applicaties ontwikkelen voor het integraal waterbeheer in Nederland, te weten Alterra, EDS, Geodan IT, TNO-NITG en WL | Delft Hydraulics.

De volgende personen zijn bij de uitvoering van het project 'Standaard Raamwerk Water – Realisatie versie 1.0' betrokken geweest.

Begeleidingscommissie:	Jandirk Bulens (vz)	Alterra
	Henk Alkemade	RIZA
	Aldrik Bakema	RIVM
	Michiel Blind	RIZA
	Piet Groenendijk	Alterra
	Jan Noort	Sepra (voor STOWA)
	Ludolph Wentholt	STOWA
	Rick Wortelboer	RIVM
Concept Control Team:	Bas van Adrichem	EDS International BV
	Ferdi van Engelen	NITG-TNO
	Jan Jellema	NITG-TNO
	Joost Maus	Geodan IT
	Jaco Stout	WL Delft Hydraulics
	Tamme van der Wal	Alterra
Projectteam:	Johan Tacke (pl)	EDS International BV
	Rob Brinkman	WL Delft Hydraulics
	Edwin Frieswijk	EDS International BV
	David Levelt	WL Delft Hydraulics
	Tonny Otjens	Alterra

De begeleidingscommissie heeft namens de stuurgroep Realisatie Standaard Raamwerk Water de voortgang van het project bewaakt en (tussen)producten inhoudelijk beoordeeld.

Het Concept Control Team heeft namens het consortium van opdrachtgevers zorggedragen voor inhoudelijke aansturing van het projectteam en voor interne reviews van de (tussen)producten.

Rapport

Raport versie 1.0

Project

Registratienummer

SRW2000

P4118-R-4



Blanco pagina.



INHOUD

Voorwoord	4
1 Inleiding	1
2 Modellen in het integraal waterbeheer	2
2.1 Soorten modellen	2
2.2 Begrippenkader 'modelleren en simuleren'	3
2.3 Koppelen van modellen	5
2.4 Wrappen van modellen	8
3 Modellen in het Standaard Raamwerk Water	11
3.1 Definitie van cases	11
3.2 Analyse per model	11
3.2.1 SOBEK	12
3.2.2 DufLOW	17
3.2.3 Modflow	20
3.2.4 Swap	22
3.2.5 Waterplanner	24
3.2.6 Animo (Stone-versie)	27
3.2.7 Stone	31
3.2.8 Mozart	37
3.2.9 GTM: Geïntegreerd Transportmodel	42
4 Tot slot	45
5 Literatuur	46
Bijlage A Kenmerkende verschillen SOBEK-River en SOBEK-Rural	48
Bijlage B Geïntegreerd Transportmodel (GTM)	50

Rapport

Raport versie 1.0

Project

Registratienummer

SRW2000

P4118-R-4



Blanco pagina.



1 Inleiding

Het voorliggende document maakt onderdeel uit van de rapportage behorend bij fase 1 van het project 'Standaard Raamwerk Water – Specificatie en Realisatie versie 1.0'. Deze fase bestaat uit de volgende onderdelen:

- Onderzoek modellen;
- Beschrijving cases;
- Functioneel ontwerp;
- Technisch ontwerp;
- Technische richtlijnen;
- Werkplan fase2 (en 3).

In dit document wordt een aantal modellen, die voor toepassing in het Standaard Raamwerk Water (SRW) in aanmerking komen, geanalyseerd. Tevens worden de cases beschreven die in versie 1.0 van het SRW worden geïmplementeerd.

In hoofdstuk 2 wordt het algemene begrippenkader rond 'Modellen in het integraal waterbeheer' gepresenteerd. De beschrijving is ontleend aan het handboek *Good Modelling Practice* [GMP99]. Daarnaast wordt in dit hoofdstuk het koppelen van modellen in algemene zin besproken.

Hoofdstuk 3 bevat naast de definitie van de cases een analyse van een negental modellen. Met name de modellen die in de volgende fase van het project bij de implementatie van de cases een rol spelen, zijn gedetailleerd bekeken. Voor de overige modellen is de analyse op hoofdlijnen uitgevoerd.

Tot slot wordt in hoofdstuk 4 een korte samenvatting gegeven.



2 Modellen in het integraal waterbeheer

In het moderne waterbeheer zijn modellen een onmisbaar hulpmiddel geworden. Steeds vaker speelt een grote diversiteit aan modellen een belangrijke ondersteunende rol bij het vervullen van de kerntaken in het integraal waterbeheer, onder meer bij de beleidsvoorbereiding, bij het operationeel waterbeheer, bij toegepast en fundamenteel onderzoek en bij het verzamelen van basisgegevens [GMP99].

Uit een enquête naar de behoeften van waterbeheerders op het gebied van inzet van modellen is onder andere naar voren gekomen dat er vaak een groot knelpunt ligt bij de koppeling tussen de verschillende modellen, gegevensbestanden en andere instrumenten die in het integrale waterbeheer worden gebruikt. Dit knelpunt is er tevens de oorzaak van dat de samenwerking op modelgebied tussen de diverse partijen in het waterbeheer wordt bemoeilijkt en dat de kosten voor modellen steeds moeilijker zijn op te brengen door individuele partijen.

Deze situatie heeft geleid tot een groeiende vraag naar een flexibele, modulaire, gestandaardiseerde structuur voor een modelinstrumentarium ten behoeve van het integraal waterbeheer, een zogenaamd *Standaard Raamwerk Water* (SRW). In een dergelijk raamwerk moeten gemakkelijk verschillende modellen en databases –ook afkomstig van verschillende organisaties– gekoppeld en aangestuurd kunnen worden. De ontwikkeling van een Standaard Raamwerk Water sluit ook aan bij de wens van veel in het waterbeheer betrokken organisaties om steeds intensiever samen te gaan werken en op een efficiënte manier met kennis en middelen om te gaan.

De realisatie van Standaard Raamwerk Water – v.1.0 is voorjaar 2000 gestart met het maken van een Functioneel Ontwerp [SRW-FO] en een Technisch Ontwerp [SRW-TO]. Omdat deze eerste versie van het SRW ook gevuld moet worden, is het nuttig en noodzakelijk een aantal modellen uit het waterbeheer in het ontwerp te betrekken.

2.1 Soorten modellen

Zoals aangegeven in [GMP99] wordt in het waterbeheer vooral gebruik gemaakt van deterministische, numerieke modellen. In dit soort modellen wordt de fysische proceskennis volledig bekend verondersteld. Alle kennis over het systeem is in het model opgeslagen in de vorm van vergelijkingen en de daarbij behorende parameters; de kennis over de omgeving van het systeem wordt toegeleverd in de vorm van ruimtelijke schematisaties en tijdreeksen.

Naar toepassingsdomein kunnen modellen in het waterbeheer als volgt worden ingedeeld:

- grondwatermodellen voor de verzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit);
- grondwatermodellen voor de onverzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit);



- neerslagafvoermodellen;
- waterverdelingsmodellen;
- hydrodynamische modellen (oppervlaktewatermodellen);
- hoogwatervoorspellingsmodellen en operationele modellen;
- calamiteitenmodellen
- morfologische modellen;
- waterkwaliteitsmodellen;
- afvalwaterzuiveringsmodellen;
- ecologische modellen;
- economische modellen en gebruiksfuncties;
- emissiemodellen.

Modellen kunnen ook op meer algemene gronden ingedeeld worden, zoals de ruimtelijke dimensie waarop ze van toepassing zijn:

- 0D (puntmodellen);
- 1D;
- 2D;
- 3D.

Soms wordt ook gesproken van quasi-2D of -3D modellen. Dit zijn geen aparte dimensies, maar het geeft een manier van schematiseren weer, bijvoorbeeld door een 2D-systeem te modelleren als een serie aan elkaar gekoppelde lijnelementen.

In het verlengde van de ruimtelijke dimensies kan ook onderscheid gemaakt worden in modellen voor lokale, regionale, nationale en internationale schaal.

Vergelijkbaar met de ruimtelijke resolutie is de resolutie in tijd. Het belangrijkste onderscheid dat hierin gemaakt kan worden is of een model stationair of dynamisch is. Hierbij speelt vaak ook het wiskundige oplossingsmechanisme een rol. Die levert op zich weer een eigen onderverdeling op variërend van puur analytisch tot volledig numeriek, en alles wat daar tussenin zit.

Modellen kunnen ook worden onderscheiden op basis van de toepassingsreden, variërend van beleidsanalytisch (grof en breed) tot wetenschappelijke onderzoeksmodellen (gedetailleerd en smal). Daar tussenin zitten nog de operationele modellen (bijvoorbeeld voor real time control van kunstwerken) en de calamiteiten modellen. Overigens is het onderscheid tussen deze terreinen niet altijd even scherp te maken. De laatste jaren is in toenemende mate te zien dat de modellen voor de diverse terreinen in elkaar overvloeien.

2.2 Begrippenkader 'modelleren en simuleren'

In het handboek *Good Modelling Practice* [GMP99] wordt het woord *model* gebruikt als verzamelbegrip voor 'representaties van essentiële aspecten van een systeem, waarbij kennis gepresenteerd wordt in een bruikbare vorm'. Hiermee wordt veelal een programma in de computer (een *modelprogramma*) bedoeld met bijbehorende invoer. Het woord 'model' kan echter ook slaan op wat opmerkingen op papier, een wiskundige



formulering, een schema of figuur die het systeem afbeelden. Een *systeem* is daarbij een deel van de werkelijkheid dat bestaat uit *entiteiten* met hun onderlinge relaties (processen) en met een beperkt aantal relaties met de werkelijkheid buiten het systeem. Een *model* is een afbeelding van een systeem als het de structuur van het systeem (entiteiten en relaties) beschrijft. Een systeem wordt wel aangeduid met object-systeem als er een model van wordt gemaakt. *Modelleren* is dan het construeren van een model van een systeem, maar dit begrip wordt ook wel gebruikt voor het werken met een model. *Simuleren* is een vergelijkbare term en wordt meestal gebruikt voor 'iets met het model op een computer te doen'. Het begrip wordt echter ook wel breder gebruikt voor 'het nabootsen van een deel van de werkelijkheid of het systeem op de computer' (dus het geheel). Dit betekent vrijwel altijd dat er een aantal aannames moeten worden gedaan die het model eenvoudiger, maar ook minder realistisch maken. Maar dit vereenvoudigen maakt het model wel beter hanteerbaar.

Om modellen weer te geven kunnen allerlei representaties worden gebruikt: gewone taal, figuren, wiskunde, enzovoort. Wiskundige formuleringen zijn de wiskundige vertaling van het conceptuele model. Voorbeelden van wiskundige formuleringen zijn: algebraïsche vergelijkingen, differentievergelijkingen, gewone differentiaalvergelijkingen, partiële differentiaalvergelijkingen, neurale netwerken, statistische modellen en combinaties hiervan.

Een model is *dynamisch* als het veranderingen in de tijd beschrijft en *stationair* of *statisch* als dat niet zo is. Een wiskundig model heeft één of meer *onafhankelijke variabelen* en één of meer *afhankelijke variabelen*. Een dynamisch model heeft tenminste de tijd als onafhankelijk variabele. Als er sprake is van een ruimtelijk model dan is tenminste één ruimtelijke dimensie ook een onafhankelijk variabele. Bij een dynamisch 3D-model is er sprake van vier onafhankelijke variabelen: de tijd en de drie ruimtelijke dimensies.

Dynamische modellen op basis van een 'harde' niet-stochastische representatie heten *deterministische modellen*: de kennis van het gemodelleerde systeem ligt vast in het model en herhaald draaien van het model levert dezelfde uitkomsten op. Een model heeft (net als het systeem waar het een afbeelding van is) een modelstructuur: toestandsvariabelen en relaties die beschreven worden met hulpvariabelen, en een modelgedrag: wat doet het model langs de as of de assen van de onafhankelijke variabelen: hoe verandert de uitkomst van een model in de tijd en/of hoe verandert het langs de ruimtelijke as(sen).

Niet-wiskundige representaties van een model worden vaak *conceptuele modellen* genoemd: de structuur is beschreven, maar de onderdelen van het model en de relaties zijn niet (allemaal) kwantitatief gemaakt. De wiskundige vergelijkingen in een model kunnen worden opgelost langs analytische weg, waardoor er voor elk punt in het domein een exacte waarde kan worden afgeleid, of langs numerieke weg, waardoor voor elk punt in het domein de exacte waarde numeriek benaderd wordt.

De entiteiten in een wiskundig model worden gerepresenteerd met behulp van één of meer *toestandsvariabelen* en relaties tussen de entiteiten met behulp van *hulpvariabelen*. De toestandsvariabelen bepalen de toestand



van het model. Veranderingen in toestandsvariabelen worden beschreven met behulp van (partiële) differentiaalvergelijkingen. Hulpvariabelen worden beschreven via algebraïsche vergelijkingen of er wordt direct een waarde aan toegekend (input). Vergelijkingen kunnen gebruik maken van toestandsvariabelen, hulpvariabelen, *parameters* (constant in de tijd), of andere *onderdelen van het model*.

Het conceptuele model wordt omgezet in een model op de computer door gegevens in te voeren in een *modelprogramma* (een wiskundig formulering in de vorm van een computerprogramma, bedoeld om modellen mee te bouwen door middel van het invoeren van gegevens). Hiervoor moeten er keuzes gemaakt worden die onder meer te maken hebben met de ruimtelijke *schematisatie*. Naast de gevolgen van deze keuzes over de *discretisatie* moeten er ook systeemgegevens worden aangeboden aan of opgenomen in het modelprogramma waarmee het model gebouwd wordt. De controle of een model goed op de computer is gezet heet *verificatie*.

Nadat een model op de computer is gezet, is het vaak nodig om de overeenkomst tussen model en systeem beter op elkaar af te stemmen, of preciezer gezegd om het modelgedrag beter overeen te laten komen met het systeemgedrag. Dit heet *calibreren* en het wordt uitgevoerd door parameterwaarden te veranderen en vervolgens de modeluitkomsten met veldmetingen te vergelijken. Om te bepalen welke onzekere factoren tijdens de calibratie moeten worden aangepast om de betere overeenstemming te bewerkstelligen kan gebruik gemaakt worden van een *gevoeligheidsanalyse*. Na afloop van de calibratie kunnen de resterende verschillen worden onderzocht en de resterende onzekerheid in de modelvoorspellingen gekwantificeerd in een *betrouwbaarheidsanalyse*. Behalve calibratie kan ook validatie plaatsvinden. *Validatie* houdt zich bezig met de vergelijking van de modeluitkomsten (de resultaten van de onzekerheidsanalyse) met een onafhankelijke, dat wil zeggen een niet bij de calibratie gebruikte set waarnemingen, aan het echte systeem om te bepalen of het model het systeem(gedrag) goed beschrijft.

2.3 Koppelen van modellen

Bij het koppelen van modellen moeten relaties gelegd worden tussen de verschillende schematisaties. Om deze relaties te leggen moeten er drie soorten vragen beantwoord worden.

1. **Wat** behelst de relatie, met andere woorden, welke informatie wordt er uitgewisseld,
2. **Waar** vindt de uitwisseling plaats en
3. **Wanneer** vindt de uitwisseling plaats.

Hierbij definiëren we een koppeling als een relatie waar, op een aantal tijdstippen, een fractie van de waarde van één parameter op één locatie wordt doorgegeven van het leverende model aan het vragende model.

Wat

Om een koppeling te kunnen maken moet het leverende model exact die parameter kunnen leveren die het vragende model nodig heeft. Dit houdt tevens in dat er (impliciet of expliciet) overeenstemming is over alle relevante aspecten van die parameter, zoals de definitie van die parameter,



de eenheid waar die parameter in uitgedrukt wordt enz. Van de parameter Waterstand moet duidelijk zijn dan deze de hoogte in meters van de oppervlaktespiegel van het water tot een vaststaand referentievlak, zoals NAP uitdrukt. Modellen kunnen slechts die parameters leveren die ze zelf berekenen (of als invoer opgekregen hebben) of die ze met “eigen” kennis kunnen afleiden; ze kunnen slechts die parameters vragen die nu al als invoer opgegeven kunnen worden¹.

De eerste voorwaarde wordt ingegeven door de eis dat een model een zelfstandige eenheid moet zijn. Als het model afhankelijk is van een andere eenheid (model; component) voor het leveren van resultaten dan is dat model niet zelfstandig en dus geen goede component.

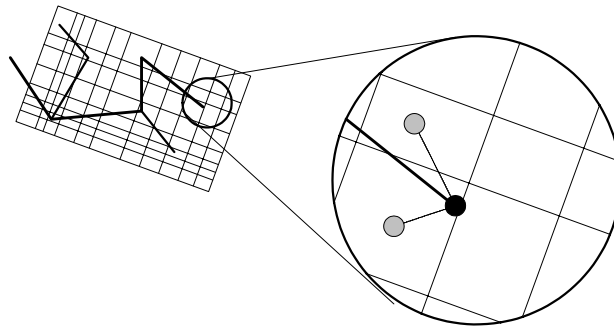
Ook aan de vragende kant zal niet iedere parameter verwerkt kunnen worden. Over het algemeen zullen modellen mechanismen hebben om invloeden van buiten tijdens de berekening te verwerken, bijvoorbeeld in de vorm van randvoorwaarden. Deze invloeden zullen op dit moment a-priori gedefinieerde invoer zijn. Andere soorten invloeden zullen in principe wel mogelijk zijn, maar zullen een grotere ingreep op het rekenhart vragen en kunnen ongewenste neveneffecten hebben. Nu lezen veel modellen bij start van de simulatie alle gegevens in. Per model zal bekeken moeten worden of er gebruik gemaakt wordt van dit principe (soms noodzakelijk om geheugen te reserveren), en er dus dummy-waarden worden ingelezen of dat er speciale randvoorwaarden worden gecreëerd waarbij wel de ruimte maar niet de waarde vooraf bepaald hoeft te zijn. Omdat de optimale aanpak per model verschilt, is het moeilijk hier een generieke oplossing voor te geven.

Speciale aandacht moet gegeven worden aan die parameters waarvoor een (massa)balans geldt, zoals debieten en vrachten. Aan de vragende kant zal dat geen probleem zijn, modellen zijn hier reeds op ingesteld. Aan de leverende kant moet er in sommige gevallen wel aandacht geschonken worden aan die balans, omdat de waarde soms expliciet aan het systeem onttrokken moet worden. Dit laatste kan alleen als het model die parameter ook als vragend systeem kent. Voor modellen waar deze waarde al berekend wordt als zijnde het systeem verlatend geldt dit uiteraard niet. Verder is dit alleen maar relevant voor berekeningen waar gegevens op tijdstapbasis uitgewisseld worden. Indien er alleen modellen offline, achter elkaar (in een “modellentreintje”) uitgerekend worden is er van beïnvloeding terug geen sprake en kan iedere beschikbare parameter geleverd worden.

Waar

Om modellen te koppelen zal er een relatie gelegd moeten worden tussen de geografische locaties. De gebruiker zal verantwoordelijk zijn voor het leggen van die relatie. In de huidige versie zal dat een 1:n-relatie zijn, waarbij de uitkomst van het leverende model op één punt volgens een bepaalde verdeelsleutel verdeeld wordt over n punten bij het vragende model. Merk op dat bij balanshoudende parameters deze verdeelsleutel moet sommen tot 100% van de onttrokken (resp. toeleverende) waarde.

¹ Merk op dat de begrippen leveren en vragen niets te maken hebben met de richting waarin de stroom is. Een model kan een negatief debiet leveren, wat inhoudt dat er water van het vragende model naar het leverende model stroomt. De begrippen hebben enkel te maken met welk model informatie kan bepalen en welk model die informatie nodig heeft.

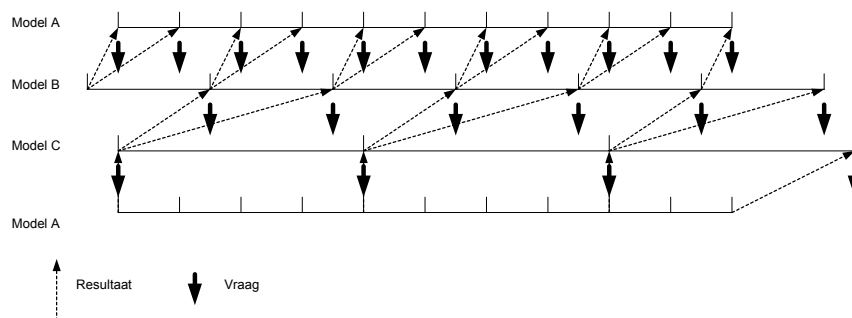


Figuur 1 Voorbeeld van koppeling tussen twee modellen (ingezoomd)

Wanneer

Bij het koppelen wordt onderscheid gemaakt tussen twee vormen van koppelen, te weten online koppelen en offline koppelen. Bij offline koppelen wordt eerst het gehele leverende model gedraaid en daarna het (gehele) vragende model. In dit type van koppeling is er per definitie geen sprake van terugkoppeling. Omdat het vragende model op het moment van vraagstelling alle beschikbare informatie van het leverende model heeft, zou deze koppeling ingericht kunnen worden naar eigen inzicht, en ook rekening houden met, vanuit de het vraagmoment, toekomstige waarden in het leverende model. Om standaardisatie en onderhoudbaarheid te bevorderen wordt ervan uitgegaan dat dezelfde interface als voor de online koppeling wordt gebruikt.

Bij online-koppeling zijn zowel het leverende als het vragende model tegelijk actief, en zullen modellen op bepaalde tijden informatie moeten leveren. Hiervoor zal het tot een bepaalde tijd rekenen en de aldus berekende waarde zal doorgegeven moeten worden. Omdat veel modellen geen begrip hebben van absolute tijd, maar rekenen met een tijdstap van bepaalde lengte ten opzichte van een niet bepaald nulpunt, zal deze absolute tijd toegevoegd moeten worden.



Figuur 2 Uitwisselingsmomenten

In bovenstaand voorbeeld kan Model B pas wat vragen aan C als C zijn eerste tijdstap (vaak de invoer) bepaald heeft. Zowel bij de eerste als de tweede tijdstap van A zal de eerste waarde van B doorgegeven worden. Hierbij kan niets gedaan worden met de waarde van de tweede tijdstap van B, want deze wordt pas berekend nadat zowel de eerste als de tweede tijdstap van A afgehandeld zijn. Dit laatste zou wel kunnen indien modellen in totaliteit na elkaar draaien.

Deze terugkoppeling kan verbeterd worden zodra de koppeling iteraties toestaat. Dit is voorzien voor een toekomstige versie, maar wordt in versie 1 nog niet geïmplementeerd.

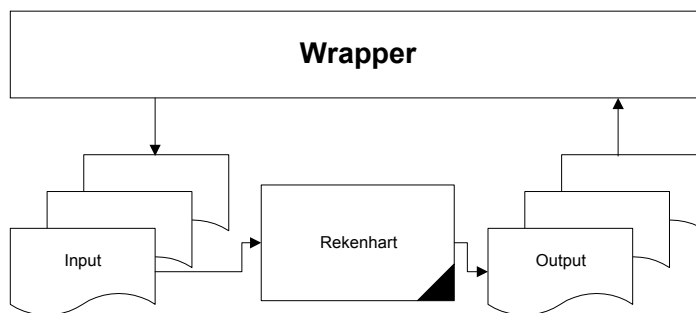
2.4 Wrappen van modellen

Om modellen geschikt te maken om in het SRW te draaien zullen ze door middel van een wrapper voorzien moeten worden van het SRW-interface. Dit zal doorgaans niet kunnen zonder aanpassingen in het rekenhart door te voeren, met name indien op tijdstapbasis gekoppeld moet worden. Voor het succes van het SRW is het van belang dat de koppelbare rekenhartten integraal onderdeel zijn van de moederversie van de oorspronkelijke pakketten om continuïteit te kunnen garanderen. Dit geeft drie mogelijkheden om de wrapper tot stand te brengen:

1. Een separate wrapper, waarbij er geen wijzigingen in het rekenhart worden aangebracht en de wrapper een aparte module is;
2. Een gekoppelde wrapper, waarbij de wrapper ook een aparte module is maar waarbij er wel wijzigingen in het rekenhart worden aangebracht en;
3. Een geïntegreerde wrapper, waarbij het rekenhart en de wrapper één geheel vormen.

Separate wrapper

In deze variant worden er geen wijzigingen aangebracht in het rekenhart. Dit betekent dat alle functionaliteit die het rekenhart van origine niet heeft door de wrapper gesimuleerd zal moeten worden.

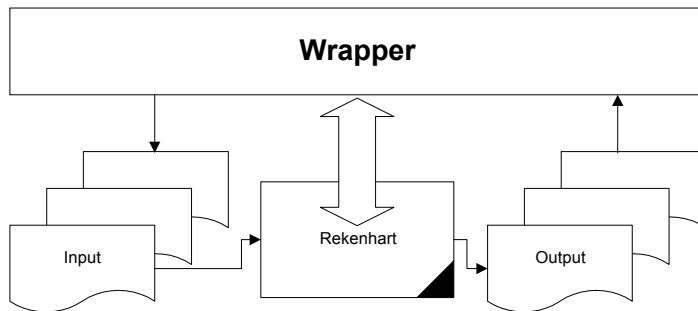


De wrapper zal door middel van wijzigingen in de invoer het rekenproces kunnen beïnvloeden. Dit betekent dat alleen die functionaliteit kan worden aangeboden die door het samenstellen van een invoerbestand, dan wel het uitlezen van het uitvoerbestand kan worden ingevuld. Indien het model zelf in tijdstappen rekt, zal een koppeling op tijdstapbasis alleen kunnen als het model hier zelf een voorziening voor heeft, bijvoorbeeld doordat vanuit de input/output-combinatie een nieuwe input kan worden afgeleid of doordat er een restart-bestand is. Nadeel van deze oplossing is wel de relatieve snelheid. In het algemeen zal deze oplossing door het continu herstarten van het model traag zijn. Voor modellen die van oorsprong al lang rekenen zal dit niet zo'n bezwaar zijn.

Door de beperkte ingreep zal deze variant weinig tot geen problemen geven binnen de reguliere omgeving.

Gekoppelde wrapper

In deze variant worden beperkte wijzigingen aan het rekenhart aangebracht, maar wel op een dussdanige manier dat de oorspronkelijke omgeving waarbinnen het rekenhart functioneert daardoor niet hoeft te veranderen. Functionaliteit die het rekenhart oorspronkelijk niet bezat zal in de wrapper of, met mate, in het rekenhart worden aangebracht.



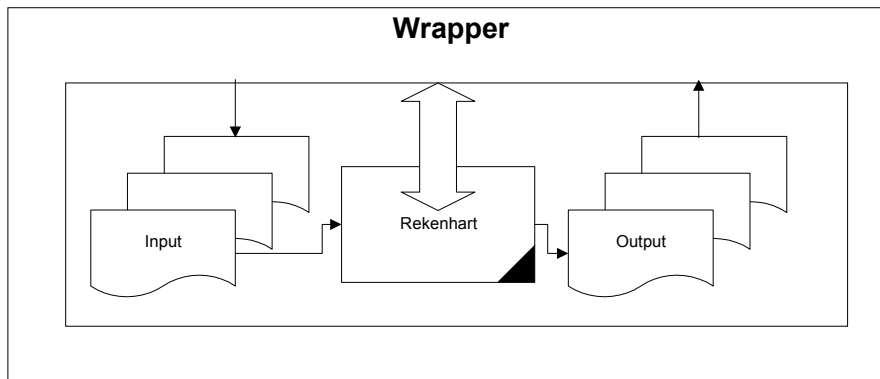
De wrapper beïnvloedt het rekenproces ofwel via het wijzigen van de invoer of direct via het rekenhart. Deze verdeling zal per model tijdens de realisatiefase moeten worden bekeken. Met name bij de koppeling op tijdstapbasis zal door een ingrijpen in het rekenhart het rekenproces wachten tot het weer door mag met rekenen zonder dat het expliciet stopt². Dit verhoogt de performance en biedt tevens een oplossing voor die modellen die geen herstart-mechanisme kennen. De bestaande koppeling tussen DufLOW en ModFLOW is op dit principe gebaseerd (zie ook paragraaf 3.2.2). De consequenties voor de reguliere omgeving kunnen worden beperkt, waarbij een balans moet worden gevonden tussen het niet aanbieden van functionaliteit in SRW-kader en het veranderen van de reguliere omgeving.

Voor veel modellen zal dit in versie 1 de manier zijn waarop ze in SRW worden ingebracht.

Geïntegreerde wrapper

Bij deze vorm van inpakken wordt het rekenhart en de wrapper tot één geheel gemaakt. Vanaf dat moment gedraagt het rekenhart zich in iedere situatie als een SRW-component, ook in de eigen omgeving.

² Dit kan bijvoorbeeld door het gebruik van semaforen.



Alle veranderingen die nodig zijn aan het rekenhart kunnen worden aangebracht. Deze variant levert de meest verregaande vorm van integratie op die alle gevraagde functionaliteit kan leveren. Nadeel is dat de bestaande omgeving aangepast moet worden, wat in eerste instantie veel inspanning zal betekenen (maar dan wel als standaard tool verder kan). Deze vorm zal voor veel modellen de uiteindelijke vorm zijn waarop ze in SRW zullen worden opgenomen. Deze situatie zal pas worden bereikt als een bepaalde basisset aan voor- en nabewerkingsprogrammatuur aanwezig is binnen SRW.



3 Modellen in het Standaard Raamwerk Water

3.1 Definitie van cases

Teneinde de werking van SRW v.1.0 aan te kunnen tonen, is in [SRW-P] voorgesteld in fase 4 van het project twee cases als basisvariant uit te werken, te weten:

1. Een regionale case, waarin een oppervlaktewatermodel (Duflow, SOBEK) zal worden gekoppeld aan een grondwatermodel en/of onverzadigde zone model (Modflow, Swap) op zowel kwantiteit als kwaliteit (voor zover de modellen dat ondersteunen).
2. Een landelijke case, waarin een landelijk SOBEK-model gekoppeld zal worden met een regionaal Duflowmodel op de aspecten kwantiteit en kwaliteit.

De feitelijke invulling van de cases (bv. welke schematisatie(s) met bijbehorende modelinvoer te gebruiken), is door de begeleidingscommissie (BC) uitgevoerd. Omwille van de acceptatiegraad is gekozen voor realistische cases, die ook in de dagelijkse praktijk van de betrokken instituten een rol spelen.

3.2 Analyse per model

Initieel is in [SRW-P] een lijst met een 15-tal modellen opgesteld, die potentieel voor toepassing in versie 1.0 van SRW in aanmerking komen. Door de BC is de lijst teruggebracht tot negen modellen; deze worden in de navolgende paragrafen onderzocht op de consequenties ten aanzien van implementatie in het SRW.

Bij de keuze van de modellen hebben de volgende criteria een rol gespeeld:

- het model is beschreven, gedocumenteerd en zo mogelijk gepubliceerd;
- met het model zijn reële cases/projecten uitgevoerd;
- het model is geïmplementeerd in een gangbare taal;
- het model wordt beheerd en er is een formele beheersorganisatie;
- het model is op korte termijn uitleverbaar;
- expertise en capaciteit is beschikbaar voor eventuele aanpassingen aan de code.

Andere overwegingen hebben betrekking op de realiteitswaarde van de case(s) die met de betreffende modellen kunnen worden ingevuld.

- schalen: (sub-)regionale schaal en landelijke schaal;
- domeinen: oppervlaktewater, grondwater en onverzadigde zone;
- thema's: waterkwantiteit, waterkwaliteit, ecologie;
- type koppeling: on-line, off-line.

Van de negen geselecteerde modellen zijn Sobek, Duflow, Modflow, Swap, Animo en de module basisafvoer van de Waterplanner in detail bekeken; voor Mozart, Stone en GTM is de analyse op hoofdlijnen uitgevoerd.



3.2.1 SOBEK

SOBEK is een 1D-modelsysteem voor de simulatie van waterkwantiteit en waterkwaliteit in oppervlaktewatersystemen en rioolstelsels.

Overeenkomstig de verschillende toepassingsgebieden worden in het SOBEK-pakket de volgende marktlijnen onderscheiden:

- SOBEK - River: voor de berekening van waterbeweging, waterkwaliteit, morfologie en sedimenttransport, zoutindringing, enz. in rivieren kanalen en estuaria (geulstelsels).
- SOBEK - Rural: waarmee waterbeheerders scenario's kunnen simuleren om te komen tot een optimaal waterbeheer in regionale en landelijke gebieden; dit betreft zowel waterkwantiteit als waterkwaliteit.
- SOBEK - Urban: een instrumentarium voor integrale studies van neerslag- en afvalwaterbeheer in stedelijke gebieden.

Daarnaast is SOBEK opgezet volgens een aantal modulelijnen. Voor iedere marktlijn zijn verschillende modules beschikbaar. Het ontwerp van SOBEK is zodanig dat deze modules zoveel mogelijk generiek bruikbaar zijn voor inpassing binnen de verschillende SOBEK marktlijnen.

SOBEK-River

SOBEK-River beschikt over de volgende modules:

- FLOW, voor de berekening van dynamische of quasi-statische, één-dimensionale stroming in netwerken van rivieren en kanalen. De module, ook wel aangeduid als CF-module (Channel Flow), voorziet tevens in een groot aantal kunstwerken (stuwen, sluizen, enz.) al dan niet voorzien van 'triggers' en 'controllers' voor de besturing ervan.
- SALT, voor het modelleren van zoutindringing, inclusief het effect van dichtheidsverschillen op de stroming.
- Water Quality, voor het modelleren van de waterkwaliteit. De WQ-module maakt gebruik van het rekenhart van DELWAQ.
- Sedimenttransport, voor het op basis van een vijftal bekende transportformules berekenen van het transport van het losse bodemmateriaal. De gebruiker kan ook een eigen formulering voor het sedimenttransport in de berekening betrekken.
- Morfologie, voor het bepalen van het resulterende effect van het sedimenttransport op bodemligging en dwarsprofiel. De programmatuur voorziet ook in een terugkoppeling van het gewijzigde dwarsprofiel naar de waterbeweging. Anders gezegd: er is sprake van een simulatie-loop, waarin achtereenvolgens waterbeweging, sedimenttransport, morfologie, waterbeweging, sedimenttransport, enz. worden berekend.

In de FLOW-module van SOBEK-River worden de vergelijkingen van De Saint Venant (continuïteits- en bewegingsvergelijking) numeriek opgelost met behulp van het 2^{de} orde Preissmann-schema. Dit impliciete schema is gebouwd op een rekenrooster, waarbij op ieder punt zowel de afvoer als de waterstand wordt berekend.

SOBEK-Rural



SOBEK-Rural beschikt over de volgende modules:

- FLOW (CF-module), voor de berekening van stroming in netwerken van sloten, boezems, kanalen, leidingen en beken, waarin opgenomen een breed scala van kunstwerken, zoals stuwen, duikers, uitwateringssluizen en pompen.
- Rainfall Runoff, voor de berekening van het neerslag-afvoerproces. In de RR-module is ook de stroming tussen grondwater en oppervlaktewaterberging interactief gekoppeld opgenomen op basis van waterstandsverschillen.
- Real-time controle module voor de sturing van kunstwerken in een beheersgebied. Hoewel de CF-module van SOBEK-Rural al een aantal sturingsmogelijkheden voor kunstwerken bevat, stelt de RTC-module de gebruiker in staat om meer complexe situaties te beschrijven.
- Water Quality, voor de berekening van de effecten van emissies op een regionaal gebied. Zoals ook aangegeven bij SOBEK-River is WQ een inpassing in SOBEK van het DELWAQ-pakket. Via een processen-editor kan de gebruiker eigen combinaties van processen simuleren. Daarnaast biedt WQ de keuze uit een aantal standaardcombinaties van processen.

Voor de beschrijving van de waterbeweging in SOBEK-Rural worden de vergelijkingen van De Saint Venant opgelost met het 1^{ste} orde, impliciete staggered upstream schema, ook wel aangeduid als het Stelling-schema. Dit rekenschema is gebaseerd op een rekenrooster waarbij afwisselend waterstanden en afvoeren worden berekend.

SOBEK-Urban

SOBEK-Urban bestaat uit de modules FLOW, Rainfall-Runoff en Real-Time Control, zoals hiervoor bij SOBEK-Rural besproken. In het bijzonder zijn SOBEK-Urban en SOBEK-Rural zodanig te koppelen dat open en gesloten waterlopen in één modelschematisatie kunnen worden opgenomen.

In bijlage A is volledigheidshalve een overzicht opgenomen van de kenmerkende (functionele) verschillen tussen SOBEK-River en SOBEK-Rural/Urban.

SOBEK in SRW

Bij de toepassing van SOBEK in SRW-v.1.0 handelt het om de gecombineerde modules CF (Channel Flow) en WQ (Water Quality) van zowel SOBEK-Rural als SOBEK-River.

Locaties in SOBEK

SOBEK-Rural kent de kaart-coördinaten van alle objecten (het is niet duidelijk of een gridpunt ook een object is). SOBEK-River daarentegen kent alleen de 'coördinaten' van de knooppunten (verbindingspunten van de takken) op een door de gebruiker gedefinieerd vierkant. De positie van alle objecten is vervolgens gedefinieerd door een tak-id, een tak-oriëntatie en een afstand op de tak.

Rekengrids in SOBEK

SOBEK Rural en SOBEK-River kennen zoals gezegd verschillende rekengrids: een Preisman-schema in River en een staggered grid (Stelling-schema) in Rural. De WQ module kent in SOBEK-Rural en SOBEK-River een ander grid dan de CF-module. Elk WQ-segment bestaat uit één of

meerdere CF gridcellen. In SOBEK-Rural is er bovendien zoiets als een *node object* met volume, in feite een gridpunt met volume. Zo'n object maakt ook deel uit van een WQ-segment, eventueel op zichzelf staand. We definiëren het begrip controle-volume: een gridcel of een gridpunt met volume.

Tijdstappen in SOBEK

SOBEK-Rural en SOBEK-River kennen verschillende manieren om met de tijd om te gaan: SOBEK-Rural heeft een variabele tijdstap (= opgegeven vaste tijdstap indien mogelijk, maar kleiner indien noodzakelijk i.v.m. stabiliteit), SOBEK-River heeft een vaste tijdstap.

SOBEK-Rural en SOBEK-River kennen elk hun eigen manier om de tijdstap van de WQ-module te relateren aan die van de CF-module. In beide gevallen is sprake van *3 verschillende tijdstappen*:

- de CF-tijdstap;
- de tijdstap in de bestanden die CF doorgeeft aan de koppelingsmodule (en dus naar WQ), de *koppel-tijdstap*;
- de WQ-tijdstap.

Onderstaande tabel geeft een overzicht van enkele kenmerkende aspecten:

Tijdstap	Randvoorwaarden	Implementatie Sobek-RI	Implementatie Sobek-RU
koppel-tijdstap	geheel veelvoud van CF-tijdstap (massa-behoudend geïntegreerd) en ook van de WQ-tijdstap (ook vanwege massabehoud)	verhouding wordt expliciet gedefinieerd	koppel-tijdstap is gelijk aan tijdstap van uitvoer
WQ-tijdstap	zie boven	door gebruiker gekozen	door gebruiker gekozen

Het feit dat er sprake is van diverse tijdstappen dient door de wrapper afgeschermd te worden voor het SRW. De wrapper moet de 'afgestemde' tijdstap (= kleinste gemene veelvoud van bovengenoemde tijdstappen) aanbieden.

Invoer voor de CF-module in SOBEK

- de laterale instroming op bepaalde typen laterale flow objecten:
 - puntlozing (in m^3/s)
 - trajectlozing (in m^2/s) die wordt uitgesmeerd over een zekere lengte
 - trajectlozing over de hele tak (in m^3/s opgegeven; alleen in Rural)
 - *geen debiet op te geven voor een zgn 2nd station lateral flow (River)*
- de waterstand op andere typen laterale flow objecten:
 - $Q(h)$ relatie (alleen River)
 - lateral structure
- de waterstand of het debiet op boundary objecten.

Invoer voor de WQ-module in SOBEK

- een vector van concentraties op alle laterale flow objecten en op alle boundary objecten;



- eventuele ‘forcing functions’ (factoren die de waterkwaliteit van buitenaf beïnvloeden) op alle controle-volumes. Een forcing function is bijvoorbeeld nodig om te koppelen aan een atmosferisch depositie model (bv. ‘zure regen’).

Zowel de concentratie-vector als het begrip forcing functions behoeven verdere definiëring op het generieke niveau, dat wil zeggen op het niveau waarop zowel SOBEK als DufLOW er iets mee kunnen. De forcing functions zijn hier genoemd vanwege volledigheid. Zij zijn niet strikt nodig en defaults zijn beschikbaar.

Uitvoer van de CF-module in SOBEK

- de waterstand op de gridpunten;
- het debiet tussen de gridpunten, dus in de gridcellen;
- het debiet op de laterale flow objecten;
- het debiet en de waterstand op de boundary objecten;
- eventuele afgeleide grootheden zoals diepte en snelheid, eenduidig en consistent te definiëren;
- eventuele grootheden ter plaatse van kunstwerken (debiet, upstream/downstream water level, evt. kruinhoogte stuw of openingshoogte onderlaat).

SOBEK-River rekent het debiet weliswaar *op de gridpunten* uit, maar het debiet is dan niet éénduidig gedefinieerd op plaatsen waar meer dan twee takken in een knoop samenkomen. Het omrekenen naar *gridcellen* (het midden tussen twee gridpunten) lost dit probleem op. *Het moet wel massabehoudend gebeuren!* . Iets soortgelijks kan ook spelen voor bepaalde afgeleide grootheden.

Uitvoer van de WQ-module in SOBEK

- een vector van concentraties in alle controle-volumes;
- eventuele ‘forcing functions’ (factoren die de waterkwaliteit van buitenaf beïnvloeden) in alle controle-volumes.

On-line of off-line koppeling tussen CF en WQ

Uitgangspunten

1. SRW gebruikt de standaardversie van SOBEK-Rural en SOBEK-River;
2. SRW communiceert met de rekenharten van SOBEK.

Huidige situatie

In huidige opzet in SOBEK wordt waterkwaliteit met Delwaq off-line berekend. Dat betekent dat eerst Sobeksim draait, resultaten wegschrijft en tot een regulier einde komt. Dan start Delwaq; er wordt via files gecommuniceerd. Uitzondering: zoutindringing (dichtheidsterm) kan on-line worden uitgerekend in SOBEK-River. In dit geval draaien beide programma's simultaan.

Analyse

Volgens uitgangspunt 2 communiceert SRW elke SRW-tijdstap met de beide rekenharten van CF en WQ. Gegeven de huidige praktijk van off-line koppeling tussen CF en WQ, betekent het gebruik van de standaardversies van SOBEK (uitgangspunt 1):

- ofwel wordt per SRW-tijdstap een volledige simulatie CF en daarna WQ doorlopen

- ofwel moeten CF en WQ on-line worden gekoppeld; beide programma's blijven 'in de lucht' gedurende een complete simulatie - hier heb je het voordeel dat de resultaten van een gehele simulatie in 1 (set) file(s) zitten en dus met de sobek-postprocessing in z'n geheel zijn te inspecteren en bewerken; voor het SRW hoeft dit niet noodzakelijk te zijn.

In het eerste geval is er een performance penalty (elke SRW-tijdstap opstarten).

De on-line koppeling is ook in andere kaders in beeld: Delft Cluster, rol van WQ in operationeel waterbeheer.

Algemene eigenschappen			
Naam model:	SOBEK-River (Sobeksim)	SOBEK-Delwaq	SOBEK-Rural (Sobeksim)
Eigenaar:	WL Delft Hydraulics, RIZA	WL Delft Hydraulics, RIZA	WL Delft Hydraulics, RIZA
In beheer bij:	WL Delft Hydraulics	WL Delft Hydraulics	WL Delft Hydraulics
Laatste versie:	2.51 (2.156)	4.40	2.06
Inhoudelijke aspecten			
Doel:	Simulatie van waterkwantiteit in oppervlaktewater-systemen	Simulatie van waterkwaliteit in (oppervlakte-) watersystemen	Simulatie waterkwantiteit in oppervlaktewatersystemen en rioolstelsels
Compartimenten:	Oppervlaktewater	Oppervlaktewater	Oppervlaktewater
Tijdeenheid:	Minuten	Minuten	Minuten
Schematisatievorm:	1-D stelsel van takken en knopen	1-D stelsel van takken en knopen	1-D stelsel van takken en knopen
Technische aspecten			
Programmeertaal:	Fortran	Fortran	Fortran
Platform (DOS/Windows, Unix,...)	WIN95/NT/UNIX	WIN95/NT/UNIX	WIN95/NT/UNIX
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil:	Apart rekenhart	Apart rekenhart	Apart rekenhart
Voor- en nabewerking:	Beschikbaar	Beschikbaar	Beschikbaar
Kwantiteit			
Invoer:	Laterale instroming, waterstand en debiet	-	Laterale instroming, waterstand en debiet
Uitvoer:	Waterstand, debiet, eventueel hiervan afleidbare grootheden (bv. snelheid)	-	Waterstand, debiet, eventueel hiervan afleidbare grootheden (bv. snelheid)
Kwaliteit			
Invoer:	-	Concentraties, vrachten	-
Uitvoer:	-	Concentraties, vrachten, forcing functions	-
Andere aspecten			
Invoer:	-	-	-
Uitvoer:	-	-	-

Voorziene activiteiten bij implementatie in SRW

1. Technische uitwerking aanpassing rekenhart(en).
Hierbij zullen drie specialisten gedurende twee weken intensief en afgeschermd van de WL-organisatie de technische uitwerking verzorgen van twee rekenharten in hun samenhang. Inspanning per rekenhart/component: 12 dagen
2. Implementatie van de interface. Inspanning: 9 dagen.



3. Testen (intern); opstellen testplan en uitvoeren testen. Inspanning: 3 dagen.
 4. Aanpassingen naar aanleiding van integratietests. Inspanning: 2 dagen.
 5. Afstemming met Sobek-ontwikkellijn; afstemming/kwaliteitsbewaking o.a. met betrekking tot versie(beheer), test in Sobek-omgeving. Inspanning: 3 dagen.
- Totale inspanning per component/rekenhart: 29 dagen.

Omwille van de efficiëntie en de specifieke rekenkundige aspecten zullen alle activiteiten door terzake deskundige Sobek/Delwaq-specialisten worden uitgevoerd.

3.2.2 Duflow

Duflow is een één-dimensionaal waterbewegingsmodel voor het berekenen van de waterbeweging en de waterkwaliteit (transport van stoffen) van het oppervlaktewater. Als zodanig is het te vergelijken met het hiervoor behandelde Sobek.

Duflow bestaat uit een familie van onderling samenwerkende producten en bevat de volgende onderdelen:

- Duflow-waterbeweging, voor het berekenen van niet-stationaire stromingen in een netwerk van kanalen, rivieren en/of geulen.
- Duflow-waterkwaliteit, voor het simuleren van het transport en de interactie van stoffen in het oppervlaktewater. De waterkwaliteitsmodule is geïntegreerd in het rekenhart van de waterbewegingsmodule, maar kan ook rekenen met vooraf bepaalde transportdata. Procesformuleringen voor de waterkwaliteitsmodule kunnen door de gebruiker zelf gedefinieerd worden met behulp van DUPROL.
- Neerslag-afvoer, door middel van RAM (regen-afvoer module). Met RAM is het mogelijk om de afvoer van neerslag naar het oppervlaktewater te berekenen.
- Koppeling met Modflow. Door middel van de module Moduflow bestaat er reeds een koppeling tussen Duflow en Modflow op tijdstapbasis (online-koppeling; zie voor een beschrijving van Modflow paragraaf 3.2.3 *Modflow*). Omdat het SRW dezelfde functionaliteit gaat bieden is Moduflow buiten dit onderzoek gehouden. De ervaring opgedaan met deze koppeling is in het verdere verhaal verwerkt.

Behalve deze inhoudelijke modules zijn er ook verschillende ondersteunende modules, zoals het centrale programma met daarin de scenariomanager, en verder de netwerk-editor voor het maken en bewerken van een schematisatie, de stekkerdoos-interface voor uitwisseling met andere programma's en de grafische uitvoermodule voor het bekijken van resultaten. Het gegevensmodel van Duflow is gebaseerd op het standaarduitwisselingsformaat (onderdeel van het Adventusstelsel).

Duflow in SRW

Bij het opnemen van Duflow in SRW is het uitgangspunt dat kwaliteit en kwantiteit integraal, als één module, worden opgenomen. De consequenties als beide separaat worden opgenomen staan verderop beschreven.



Locaties

Duflow kent een eigen, lokaal coördinatenstelsel (meters t.o.v. eigen oorsprong). Tevens is gegeven hoe het stelsel ligt ten opzichte van het noorden (hoek). Om Duflow op te nemen moet de wrapper extra informatie hebben over de geografische locatie van de oorsprong en functionaliteit om van de overige punten de locatie te berekenen.

Tijdstappen

Duflow rekent in tijdstappen met een vaste, gegeven lengte in (tienden van) minuten. Een typische tijdstap is 10 minuten, een simulatie orde dagen tot maanden.

Dit alles betekent dat, om de absolute tijd te bepalen, informatie moet worden toegevoegd over het exacte tijdstip van tijdstap 0, het begin van de berekening. Op iedere tijdstap kan Duflow informatie opnemen en leveren.

Koppelpunten

Bij de punten waar Duflow kan koppelen moet onderscheid gemaakt worden tussen invoerpunten en uitvoerpunten.

Duflow kan invoer verwerken door middel van het randvoorwaarde-mechanisme. Dit impliceert dat Duflow op iedere locatie waar een randvoorwaarde gedefinieerd kan worden een koppel-invoerpunt kan hebben. Duflow accepteert invoer randvoorwaarden in de vorm van debieten, waterstanden en Q-H-relaties (hier waarschijnlijk minder relevant) voor de kwantiteitsberekeningen en concentraties en vrachten voor de kwaliteitsberekeningen.

Uitvoer kan op ieder rekenpunt worden gedefinieerd. Duflow kan dezelfde parameters als rekenresultaat opleveren als hierboven al bij de beschrijving van de invoer zijn aangegeven. De door Duflow berekende debieten zijn beschikbaar op het begin en einde van elke rekensectie. Op een rekenpunt kan het zo zijn dat er niet een eenduidig debiet opgevraagd kan worden. De waterstanden zijn op alle rekenpunten beschikbaar.

Regen-afvoer module

De regenafvoer module RAM is een aparte module om de afvoer van regen te berekenen voordat het in het oppervlaktewater stroomt. In SRW-termen is het een offline koppeling, de uitvoer van RAM is invoer voor Duflow. Als offline koppeling is dit nog steeds bruikbaar. Omdat de afvoer mede bepaald wordt door de situatie in het oppervlaktewater, het grondwater en de onverzadigde zone lijkt het zinnvoller om dit afvoerproces als een online proces te implementeren. Er is nader onderzoek nodig om de implicaties hiervan in kaart te brengen, ook in relatie tot vergelijkbare functionaliteit in SWAP (zie paragraaf 3.2.4). De regen-afvoer functionaliteit van Duflow zal daarom geen onderdeel uitmaken van versie 1 van SRW. Naar verluidt zal in Duflow-kader mogelijk nog dit jaar een on-line koppeling tussen Duflow en Ram worden gerealiseerd.

Splitsen kwaliteit en kwantiteit

Binnen Duflow heeft de kwaliteitsberekening geen invloed op de kwantiteitsberekening. Dit impliceert dat beide processen gescheiden kunnen worden, waarbij de kwaliteitsmodule debietinformatie aangeleverd moet krijgen van een oppervlaktewater flow model (zoals Sobek of Duflow). Omdat beide processen nu in één en hetzelfde rekenhart geïmplementeerd zijn, zullen voor een fysieke scheiding twee versies van het rekenhart gemaakt moeten worden. In de eerste zal alleen de kwantiteit worden



berekend, in de tweede de kwaliteit. Merk op dat deze laatste nooit zal kunnen draaien zonder dat er kwantiteitsgegevens beschikbaar zijn. Omdat Duflow nu al kwaliteit kan berekenen gebaseerd op vooraf bekende kwantiteitsgegevens is deze splitsing zonder al te veel inspanning mogelijk. Deze splitsing zou wel grote consequenties hebben voor de huidige versie van Duflow.³ Om met een gesplitst rekenhart te kunnen omgaan zal zowel in de voor- als in de nabewerking als ook in het rekenen zelf het programma gewijzigd moeten worden.

Vanuit de ervaring met Moduflow kan gesteld worden dat het met een beperkte ingreep in het rekenhart mogelijk is om de gevraagde SRW-functionaliteit te bieden. Hierbij zou nader onderzocht moeten worden hoe met regenafvoer in SRW-kader zou moeten worden omgegaan.

Algemene eigenschappen	
Naam model	Duflow
Eigenaar:	Stowa
In beheer bij:	MX.Systems
Laatste versie:	3.3
Inhoudelijke aspecten	
Doel:	Berekenen van de waterbeweging en de waterkwaliteit (transport van stoffen) van het oppervlaktewater
Compartimenten:	Oppervlaktewater
Tijdeenheid:	Minuten
Schematisatievorm:	1-D stelsel van knopen en takken
Technische aspecten	
Programmeertaal:	Fortran
Platform (DOS/Windows, Unix,...)	W95/NT
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil:	Apart rekenhart
Voor- en nabewerking:	Via netwerk-editor en grafische schil
Kwantiteit	
Invoer	Debieten, waterstanden
Uitvoer	Debieten, waterstanden, snelheden
Kwaliteit	
Invoer	Concentraties, vrachten, reactieschema
Uitvoer	Concentraties, vrachten
Andere aspecten	Koppeling met regenafvoer, koppeling met Modflow
Invoer	Debieten
Uitvoer	Standaard duflow

Voorziene activiteiten bij implementatie in SRW

1. Technische uitwerking en implementatie aanpassing rekenhart.
Geschatte inspanning: 11 dagen.
2. Implementatie van de interface/wrapper. Inspanning: 9 dagen.
3. Opstellen testplan en uitvoeren testen (intern). Inspanning: 3 dagen.
4. Aanpassingen naar aanleiding van integratietests. Inspanning: 3 dagen.
5. Afstemming met standaardversie Duflow;
afstemming/kwaliteitsbewaking o.a. met betrekking tot versie(beheer),
test in lokale Duflow-omgeving. Inspanning: 3 dagen.

³ Omdat Flow en Quality in Duflow nu al los van elkaar kunnen draaien, is het maken van twee losse modules in strikte zin niet nodig.



Totale geschatte inspanning: 29 dagen.

3.2.3 Modflow

Modflow is een waterkwantiteitsmodel voor de berekening van grondwaterstromen (verzadigde zone); kwaliteitsberekeningen kunnen niet met Modflow gemaakt worden. Modflow is een internationaal pakket waar zowel commercieel als in de vorm van shareware veel modules, zoals voor- en nabewerking voor te vinden zijn. De belangrijkste module die hier een rol speelt is de module River (of Branch) waarmee de infiltratie vanuit het oppervlaktewater (statisch) kan worden gesimuleerd.

In tegenstelling tot de andere hier genoemde modellen is Modflow niet in beheer bij één van de bij SRW aangesloten bedrijven/instituten. Hierdoor zal de SRW-versie van Modflow vooralsnog geen onderdeel uitmaken van de moederversie van Modflow, en zal separaat beheer en onderhoud voor deze versie geregeld moeten worden.

Locaties.

De structuur van het horizontale grid moet aangeboden worden aan het Raamwerk.

Daartoe moet het grid uit de modeldatabase omgezet worden naar standaard RD coördinaten en de middelpunten van de blokken moeten worden bepaald aangezien deze als koppelpunten gaan fungeren. Voor een gemakkelijk gebruik door de modelleur lijkt het voordelig de uitwisseling met oppervlaktewater via de module "RIVER" of "BRANCH" te laten verlopen⁴. Dit houdt in dat ook connector informatie tussen de koppelpunten beschikbaar behoort te zijn.

Het opladen van de randvoorwaarden en fysieke condities

Dit is een gebruikelijke handeling in de bestaande in- en outputsoftware.

Het is te verwachten dat dit met minimale inspanning gerealiseerd kan worden

Aansturing.

Via de Wrapper wordt het model aangestuurd. Dat wil zeggen dat events als Start/Stop, veranderende gegevens per koppelpunt, tijdstapgrootte vanuit het Raamwerk, PKBT aan het rekenhart worden doorgegeven.

Draaien model.

Voor het efficiënt draaien van het model zal nodig zijn dat het rekenhart voor een deel van zijn in- en uitvoermodules ontdaan wordt en zo direct mogelijk wordt aangestuurd. Normaal haalt MODFLOW aan het begin van een stress-period zijn informatie uit een klaarstaande ASCII-file. Tijdens de tijdstappen worden de gegevens intern bijgehouden.

Na afloop van een stress-period vergelijkt het Raamwerk de gegevens en zal een andere set externe gegevens aan de koppelpunten toesturen. Deze worden daarna verwerkt tezamen met externe gegevens van andere bronnen. Het is duidelijk dat de interne gegevens verder niet veranderen en dus ook niet opnieuw ingelezen hoeven te worden. Er is een efficiënt hulpmiddel nodig om ervoor te zorgen dat deze interne gegevens in het

⁴ Bij Moduflow is van dezelfde constructie gebruik gemaakt.



proces blijven en niet elke keer opnieuw de complete ASCII-file benodigd is.

Algemene eigenschappen	
Naam model:	MODFLOW
Eigenaar:	USGS United States Geological Survey
In beheer bij:	idem
Laatste versie:	Meerdere modules met eigen versies
Inhoudelijke aspecten	
Doel:	Geo hydrologische stroming
Compartimenten:	De ondergrond, verzadigde zone. Alleen kwantitatieve berekeningen, geen grondwaterkwaliteit
Tijdeenheid:	Het programma kent stressperioden waarin de externe parameters vastliggen. Daarbinnen wordt gerekend met tijdstappen.
Schematisatievorm:	De vaste schematisatie vorm is een drie-dimensionaal grid, waarbij de horizontale en verticale afmetingen niet gelijk hoeven te zijn.
Technische aspecten	
Programmeertaal:	Fortran
Platform (DOS/Windows, Unix,...):	DOS/WIN3.1/NT/UNIX
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil:	MODFLOW kent veel verschillende schillen, welke commercieel verkrijgbaar zijn. Echter alle schillen werken wel met een standaard in- en uitvoerformaat in ASCII
Voor- en nabewerking:	Meerdere marktpakketten beschikbaar
Kwantiteit	
Invoer:	Per element kan een stijghoogte worden aangegeven als beginstadium. Ook kunnen in de randelementen een debiet als randvoorwaarde worden meegegeven. De modules River en Branch kennen meerdere voorzieningen om gegevens Q, weerstand uit het oppervlak als randvoorwaarde aan MODFLOW door te geven.
Uitvoer:	Uitvoer vindt plaats als stijghoogte en flux per element.
Kwaliteit	
Invoer:	Geen
Uitvoer:	Geen
Andere aspecten	
Invoer:	Geen
Uitvoer:	Geen

Voorziene activiteiten bij implementatie in SRW

1. Aanbieden geometrische informatie.

Voorgesteld wordt gebruik te maken van een inputform, waar de coördinaten en eigenschappen van de koppelpunten kunnen worden ingevuld. We beperken ons hier tot enkele entry forms, aangezien de plaatsgegevens binnen Modflow vaak relatief zijn en niet opgehangen aan een coördinatensysteem. Geschatte inspanning: 7 dagen.

2. Aansturing.

De normale in- en uitvoerprocedures voor Modflow moeten flink worden aangepast. Naast de gebruikelijke randvoorwaarden, waaronder ook tijdsafhankelijke, welke allemaal actief moeten blijven, komt er een extra start-stop functionaliteit bij en een extra kwantitatieve input vanuit de centrale SRW-module. Ook zullen gegevens als tijdstapgrootte en



status op een andere manier afgehandeld moeten worden. Geschatte inspanning: 22 dagen.

3. Rekenhart.

Voor het efficiënt draaien van het model zal de interface van het rekenhart met de buitenwereld aangepast moeten worden. In plaats van steeds opnieuw alle gegevens op te vragen per stress periode is een meer efficiënte methode nodig. Geschatte inspanning: 35 dagen.

Totaal geschatte inspanning: 64 dagen voor een gekwalificeerd software-engineer.

3.2.4 Swap

Swap is een model dat de waterbeweging, het transport van opgeloste stoffen (zoals zout en pesticiden) en temperatuur en de groei van planten uitrekent voor de (top van de) verzadigde en met name voor de onverzadigde zone onder invloed van regenval en laterale grond- en oppervlaktewaterstromen.

Geografisch gezien is het een punt-model, met een laagstructuur in de verticale component. SWAP is reeds als component opgenomen in het door Alterra ontwikkelde FIW (Framework Integraal Waterbeheer), wat mede als basis is gebruikt voor het Architectuur-rapport.

Locaties

SWAP kent zelf zijn geografische locatie niet, deze zal in de wrapper moeten worden toegevoegd. Overigens is in de meteorologische invoer wel sprake van enige geografische informatie, echter onvoldoende om een eenduidige locatie vast te stellen.

Tijdstappen

SWAP rekent over verschillende jaren, waarbij invoer en uitvoer doorgaans op dagbasis wordt verwerkt⁵. SWAP werkt met een expliciete tijdsnotatie, dus voor de koppeling is deze direct bruikbaar.

Koppelpunten

Swap is te koppelen op de in- en uitstromende fluxen (regenval, grondwater, oppervlaktewater, naastliggende panden) en (mogelijk) bijbehorende concentraties en temperatuur. Deze kan het zowel als invoer en als uitvoer hanteren. Als uitvoer kan tevens de interne toestand, zoals waterstand, temperatuur en gewasgegevens doorgegeven worden. Omdat één SWAP-instantie op precies één geografische locatie rekent zal dit per definitie het koppelpunt zijn. Hierbij kan nog wel in onderscheid gemaakt worden per laag, waardoor in essentie per laag een koppelpunt ontstaat.

Speciale aandacht is wel nodig voor de manier waarop SWAP zich presenteert in met name het PKBT. Omdat voor een simulatie van een gebied van enige omvang enige tientallen tot honderden SWAP-instanties zijn, bestaat het risico dat in het PKBT SWAP ook enige tientallen tot honderden malen voorkomt. Dit kan opgelost worden door ofwel in de wrapper rond SWAP er voor te zorgen dat met deze meerdere instanties

⁵ Hier kan voor expliciet benoemde tijdstippen een uitzondering op worden gemaakt.



van het rekenhart kan werken ofwel door in het PKBT de optie op te nemen om meerdere instanties van één en hetzelfde model als één geheel te presenteren. De keuze hiervan hangt mede af van de wenselijkheid om laterale SWAP-SWAP-flows te kunnen verwerken. Goede verwerking hiervan zal mogelijk een oplossing in de wrapper vereisen.

SWAP zal naar verwachting zonder al te veel problemen als model-component kunnen worden opgenomen. Hierbij is de ervaring die opgedaan is bij het wrappen van SWAP voor het FIW van groot belang. Enige aandacht dient gegeven te worden aan de relatie SWAP – PBKT.

Algemene eigenschappen	
Naam model:	SWAP (Soil Water Plant and Atmosphere)
Eigenaar:	Wageningen University and Research
In beheer bij:	J.G. Kroes, MSc
Laatste versie:	2.0.7d
Inhoudelijke aspecten	
Doel:	Simulatie van waterstroming, temperatuur en stoftransport in de onverzadigde zone van de bodem en het bovenste deel van de verzadigde zone in een eendimensionale verticale bodemkolom. Simulatie kan in samenhang met gewasgroei/droge stofproductie. Effecten van peilbeheer kunnen worden gesimuleerd door het bijhouden van een balans van het oppervlaktewater (bakje met overstort). Berekening van de waterbalans voor de genoemde kolom
Compartimenten:	Onverzadigde zone, bovenste deel van het verzadigde grondwater, en bakje voor het oppervlaktewater. Door middel van opties kunnen delen van het model afgekoppeld worden (temperatuur, stoftransport, oppervlaktewater).
Tijdeenheid:	Tijdsafhankelijke Invoergegevens worden op dagbasis ingevoerd. Het model kent verder een eigen rekenstap ivm de numerieke oplossing. Model heeft geen optie voor stationair rekenen. Model kent behalve tijdstappen ook tijd (Julian daynumber) ivm gewasgroei etc.
Schematisatievorm:	Bodemkolom wordt onderverdeeld in bodemhorizonten. Horizonten worden onderverdeeld in rekencompartimenten. Relatie met oppervlaktewater wordt via een grondwater-standsafvoerrelatie verrekend. Relatie met dieper grondwater wordt eveneens via een Cauchy-relatie gedefinieerd. De lengte-eenheden worden in cm's opgegeven. Maaiveld wordt gedefinieerd als 0-niveau.
Technische aspecten	
Programmeertaal:	Fortran 77
Platform (DOS/Windows, Unix,...):	Dos
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil:	Geïntegreerd met routines voor invoer- en uitvoer. Verder is een versie in Delphi beschikbaar met een Windows-schil voor invoer en uitvoer.
Voor- en nabewerking:	Via schil, enkele losse programma's (Helena, Poseidon, etc.), of anders via ascii-editor
Kwantiteit	
Invoer:	Neerslag, referentieverdamping, gemeten grondwaterstanden (optioneel), kwel/wegzijging



	per dag. Relatie met oppervlaktewater grijpt in op gehele kolom. Relatie met grondwater grijpt in op de waterverzadigde lagen.
Uitvoer:	Balansen per dag of per jaar, tijdreeksen van toestanden en snelheden per dag
Kwaliteit	
Invoer:	Stoftransport in SWAP alleen gebruiken als binnen een tijdstap interactie optreedt tussen watertransport en stoftransport (effect van zout op de gewasverdamping). Concentraties regenwater, irrigatiewater, kwelwater. (vaste waarde of per dag: vraag voor Joop Kroes)
Uitvoer:	Balansen per dag of per jaar, tijdreeksen van toestanden en snelheden per dag
Andere aspecten	Opties voor gewasgroei. Behoort niet tot de core van SWAP Van SWAP is ook een afzonderlijk rekenhart beschikbaar (DLL) voor het watertransport, welke voor een zelf te kiezen tijdstap aangeroepen kan worden: Aquarius-versie FrameworkIntegraalWaterbeheer-versie
Invoer:	
Uitvoer:	

Voorziene activiteiten bij implementatie in SRW

1. Ontwerp SWAP rekenkern.
SWAP is op dit moment als Fortran executable en als FIW DLL beschikbaar. Doordat de definitie en interface van Modelapplication niet overeenkomt met de FIW specificaties is een herontwerp noodzakelijk (binnen FIW is de SWAP-rekenkern een toestandsloze rekenkern en omvat dus niet de schematisatie). Geschatte inspanning: 6 dagen.
2. Implementatie SWAP rekenkern.
Op basis van het herontwerp kan de SWAP rekenkern worden gerealiseerd. Geschatte inspanning: 6 dagen.
3. Implementatie ModelApplication interface.
Implementatie van dit interface zorgt voor de vertaalslag van ModelApplication methodes naar SWAP functies. Geschatte inspanning: 8 dagen.
4. Ontwerp en implementatie Property-editor.
Voor specifieke instellingen van rekenkernen kan een ModelApplication een eigen editor aanbieden. Voor SWAP wordt een dergelijke editor gemaakt. Geschatte inspanning: 5 dagen.

Totaal geschatte inspanning: 25 dagen.

3.2.5 Waterplanner

Generiek model voor snelle ruimtelijk integrale evaluatie van beleidsvarianten op het gebied van milieu, natuur en ruimte. Bepalen van de invloed van ruimtelijke functiedruk (belasting) op de toestand van het grond- en oppervlaktewatersysteem (kwantitatief en kwalitatief) en het effect via het watersysteem op water gerelateerde functies (zie figuur).



Kernconcept

- ruimtelijke relaties via het watersysteem (watersysteem/stroomgebiedsbenadering) zoals vastgelegd in het Waterstaatkundig Informatie Systeem (WIS)
- modulaire gegevenskoppelingen met Ruimtescanner, Natuurplanner (Terraplanner + Waterplannner), Landelijk Grondwater Model (LGM), PCDitch, PCLake, MOVE-Aquatisch, Leefomgevingsverkenner (LOV).

Model dat

- ruimtelijke relaties tussen ruimtegebruik-functies (druk - effect) via water bepaalt
- gebruik maakt van (bestaande) informatie uit specifieke detailonderzoek/modellen (bv. LGM, WSV-vermesting kengetallen / STONE / NPKrun, PCDitch / retentiefactoren) direct of in de vorm van kengetallen
- op landsdekkende regionale schaal
- als (water-)module aansluit bij STONE, Natuurplanner, DSS Groene Ruimte, LOV etc.

Bevat ook een water source-receptor matrix, opgebouwd uit grond- en oppervlaktewaterwaterstromingsrelaties. Oppervlaktewater- en ondiepe grondwaterstromingsrelaties zijn afkomstig uit het WIS; de diepe grondwaterstromingsrelaties zijn berekend met LGM.

Toepassingen

Milieuverkenningen, Natuurverkenningen, Leefomgevingsverkenner, VIJNO, Gebieden en Stroom (RPD)

Ruimtelijke schaal

Basis-stroomgebiedseenheid: afwateringseenheid (= oppervlaktewater-afwateringssysteem zoals afwateringssloten, plassen/meren, kanalen + lokaal grondwatersysteem; grootte basiseenheid ca. 100-10.000 ha) aansluitend op rijkswateren. **Landsdekkend en regionaal.**

Waterplanner Module Basisafvoer

Doel is het berekenen van de basisafvoer van een stroomgebied op basis van de ruimtelijke verdeling van functies. Hierbij wordt een relatie gelegd tussen gebieden waar inzijging en gebieden waar lokale kwel optreedt. Diepe kwel (grondwaterstroming op regionale schaal) wordt hierbij niet meegenomen. Veranderingen in het landgebruik, met de daaraan gekoppelde veranderingen in de lokale hydrologische situatie, veroorzaken veranderingen in drainage, berging en kwel.

De module berekent voor een hydrologische eenheid (afwateringselement) aan de hand van een verandering in landgebruik een nieuwe grondwatertrap, verandering van de berging en bijbehorende kwelintensiteit en de basisafvoer. De berekening wordt uitgevoerd per unieke combinatie van afwateringselement, grondwatertrap, kwel-type en landgebruik (basisgrid van 25 x 25 m) en geaggregeerd tot afwateringselement en vervolgens stroomgebied. Het voortraject bestaat uit het maken van overlays van de verschillende kaarten om tot de unieke combinaties te komen waarvoor gerekend gaat worden. Het natraject bestaat uit het presenteren van de resultaten per stroomgebied.



Input

- WIS-kaart Afwateringselementen; Opdeling van Nederland in 17450 afwateringseenheden.
Type: polygonen
- WIS-kaart Stroomgebieden; Groepering van de afwateringseenheden in 200 stroomgebieden voor het vrij-afwaterend gebied in Nederland
Type: polygonen
- Grondwatertrappenkaart
Type: grid; gebruikte resolutie: 250 x 250 m.
- Kwel-kaart; Kaart met kwel-typen (bron: LKN) gebruikt voor verdere karakterisering van de gebieden
Type: grid; resolutie: 1 x 1 km
- LGN-kaart; Kaart met huidig landgebruik
Versie: 3
Type: grid; resolutie: 25 x 25 m.
- Kaart met gewijzigd landgebruik
Type: grid; resolutie: 25 x 25 m.

Output

- Kaart met grondwatertrappen bij gewijzigd landgebruik
Type: ascii-grid
- Tabel met het verloop van de basisafvoer gedurende het zomerhalfjaar per afwateringseenheid/stroomgebied
Type: ascii.

Waterplanner in SRW

Voor SRW is gekozen om voorsnog alleen de module Basisafvoer van de Waterplanner te beschouwen. Deze module kan toegepast worden in gebieden waar lokale inzigging en kwel optreden (in een vrij-afwaterende regio). Als invoer kan een berekende grondwaterstand gebruikt worden. De uitvoer kan gebruikt worden om het effect van veranderingen in het landgebruik in een stroomgebied op het gemiddelde debiet in een beek te schatten (o.a. schatten van permanentie).

Locaties

In de Waterplanner wordt veel gewerkt met GIS-bestanden. Voor elke afwateringseenheid (grootte variërend) waarin zowel inzigging als kwel optreedt kan het effect op de lokale kwel doorgerekend worden. Hiervoor dient voor de als kwel en inziggingsgebied aangegeven gebieden een schatting van de grondwaterstand aanwezig te zijn. Het middelpunt van deze gebieden kan als koppelpunt gebruikt worden. De berekende debieten kunnen gaggregeerd worden per stroomgebied, dat afwatert op het hoofdnetwerk.

Tijdstappen

De basisafvoer wordt berekend voor het zomerhalfjaar, waarbij dagelijks een debiet berekend wordt.

Algemene eigenschappen	
Naam model:	Waterplanner, module Basisafvoer
Eigenaar:	RIVM
In beheer bij:	LWD, RIVM



Laatste versie:	1.0
Inhoudelijke aspecten	
Doel:	Bepalen van de invloed van ruimtelijke functiedruk (belasting) op de toestand van het grond- en oppervlaktewatersysteem (kwantitatief en kwalitatief) en het effect via het watersysteem op water gerelateerde functies; meer specifiek: het bepalen van het effect van ruimtelijke inrichting op de basisafvoer van stroomgebieden.
Compartimenten:	Oppervlakte water, bodemwater
Tijdeenheid:	dag
Schematisatievorm:	divers
Technische aspecten	
Programmeertaal:	Visual Basic
Platform (DOS/Windows, Unix,...):	Windows NT
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil:	Gescheiden
Voor- en nabewerking:	Aggregatie en visualisatie in GIS-omgeving
Kwantiteit	
Invoer:	Grondwaterstand, veranderend landgebruik
Uitvoer:	Debieten, gewijzigde grondwaterstanden
Kwaliteit	
Invoer:	-
Uitvoer:	-
Andere aspecten	
Invoer:	-
Uitvoer:	-

Voorziene activiteiten bij implementatie in SRW

1. Implementatie modelinterface (basisschil die communiceert met het raamwerk en voor de registratie van het model zorgdraagt, gegevens levert over schematisatie en koppelpunten, etc.). Geschatte inspanning: 2 dagen.
2. Data-voorbereiding: punten naar ASCII-grid conversie, polygoon naar ASCII-grid conversie (WIS-kaart) en ASCII naar OpenGIS image conversie vice versa. Geschatte inspanning: 9 dagen.
3. Model starten. Command-line operatie met de ASCII-grids ed. als parameters. Geschatte inspanning: nihil.
4. Data-nabewerking. Tabeluitvoer (standaard data-formaat), kaartuitvoer (OpenGis gml-formaat). Geschatte inspanning: 5 dagen.
5. Testen inclusief herstel. Geschatte inspanning: 4 dagen.

Totaal geschatte inspanning: 20 dagen.

3.2.6 Animo (Stone-versie)

ANIMO is ontwikkeld bij het ICW (1985) voor de kwantificering van de nitraatconcentratie in het bovenste grondwater en de uitspoeling van N en P-componenten naar grond- en oppervlaktewater. Alhoewel de hydrologie in de meeste gevallen een belangrijke drijvende kracht is achter de uitspoeling berekent ANIMO zelf geen waterbalanstermen. De hydrologische informatie die ANIMO nodig heeft wordt aangeleverd door hydrologische modellen zoals SWAP, MOZART of SIMGRO. Het model zou er extra complex door geworden zijn en ook uit het oogpunt van performance is een integratie van hydrologie en stoffenuitspoeling sterk af



te raden. Bij één bepaalde hydrologische situatie wil men vaak de effecten weten van een reeks aan ingrepen in het bemestingsregiem.

ANIMO is in de afgelopen 15 jaar in een reeks aan onderzoeksprojecten toegepast, meestal binnen de omgeving van de directe modelontwikkelaars. Door de grote mate van ervaring die vereist is voor een succesvolle toepassing is er een terughoudend beleid gevoerd tav het veelvuldig verspreiden van het model. Met geschematiseerde invoer tav bodem, gewas en procescoëfficiënten maakt ANIMO deel uit van het landelijke consensusmodel STONE.

Vanwege de sterke interactie van stikstof en organische stof is in het model naast een volledige beschrijving van de stikstofkringloop in de bodem ook een volledige beschrijving van de organische stofkringloop in de bodem opgenomen. Optioneel kan ook een simulatie uitgevoerd worden van de fosfaatkringloop. In de bodem zijn 4 pools van organische stof verondersteld:

- verse organische stof toegediend met mest, gewasresten en uit andere bronnen
- opgeloste organische stof
- wortellexudaten en afgestorven fijne haarwortels
- humus/biomassa

De verse organische stof is in verschillende fracties ingedeeld. De afbraaksnelheid van de pools bedraagt enkele dagen tot tientallen jaren.

Aan alle pools worden waarden van een stikstofgehalte en een fosforgehalte toegekend. Voor fosfaat is een afzonderlijke bodemchemische module opgenomen, welke de momentane sortptie en de kinetische sorptie/vastlegging beschrijft. Voor een modelrun moeten 50 tot 100 procesparameters worden ingevuld.

ANIMO rekent voor een plot, waarvan de coordinatie niet perse bekend hoeven te zijn. De gebruiker definieert een verticale schematisering. In de landelijke toepassing binnen de STONE-omgeving is deze verticale schematisering vastgesteld. Door de semianalytische oplossing naar de tijd heeft de gebruiker een bepaalde mate van vrijheid om zelf de rekentijdstap in te stellen.

De rekencode is geprogrammeerd in Fortran77. De in- en uitvoer (globale variabelen) van de verschillende subroutines is afzonderlijk beschreven. De lokale variabelen worden voor het verlaten van een routine stelselmatig gereset. Hierdoor is ANIMO geschikt om als module opgenomen te worden in een modelapplicatie waarin de uitspoeling van stoffen in meerdere kolommen wordt gesimuleerd.

Koppelingsmogelijkheden

De koppelingsmogelijkheden bestaan uit:

- Per tijdstap kan men de opname van N en P door een vegetatie opleggen. ANIMO heeft afzonderlijke modules voor de opname van N en P van akkerbouw en mais en een module voor de opname, gecombineerd met droge stofproductie in relatie tot beweiding en maaien van grasland. Opties zijn aanwezig om deze modules uit te schakelen en een forcing function voor de gewasopname te definiëren.
- De tijdstap zou men de randconcentraties tav neerslag, kwel en infiltrerend oppervlaktewater kunnen definiëren.



- De droge depositie kan men definiëren als tijdsfunctie. De standaardversie voert een berekening uit waarin in iedere tijdstap een zuurstofprofiel wordt berekend tbv aeratie/denitrificatie berekeningen.. In de Stone-versie van ANIMO is deze module vervangen door een formulering waarin denitrificatie en mineralisatie wordt berekend in relatie tot het waterverzadigde vochtgehalte. In deze versie hebben de bodemcompartimenten alleen een relatie tot elkaar via het watertransport. Aangezien in het model een expliciete rekenwijze is geïmplementeerd kan een module gemaakt worden waarin in een enkel bodemcompartiment de simulaties tav organische stofkringloop en de andere kringlopen worden doorgerekend.

Implementatie in SRW

Bij implementatie in de SRW-software:

- dienen de modules voor invoer en uitvoer en de modules voor het afleiden van procesparameters uit afgeleide informatie gescheiden te worden van het eigenlijke rekenhart;
- dienen de toestandvariabelen en procesparameters van een bodemkolom tussen de aanroepen door ergens bewaard te worden;
- dient bijzondere aandacht besteed te worden aan de initialisatie methodiek waarmee de omvang van de stoffenpools en de verdeling over deze pools wordt berekend.

Algemene eigenschappen	
Naam model:	ANIMO / GONAT
Eigenaar:	Wageningen University and Research
In beheer bij:	Ing. J. Roelsma
Laatste versie:	3.7.5
Inhoudelijke aspecten	
Doel:	Kwantificering van de uitspoeling van N- en P-componenten naar grond- en oppervlaktewater: bij verschillende vormen van landgebruik, waterbeheer en bemestingsstrategien. ANIMO rekent voor 1 rekenplot (perceel; subregio). In regionale toepassingen verzorgt GONAT de logistiek van in- en uitvoer en de aansturing van ANIMO
Compartimenten:	Onverzadigde zone, bovenste deel van het verzadigde grondwater, gewas/vegetatie.
Schematisering van tijd:	<p>a) Tijdsafhankelijke Invoergegevens worden op dagbasis of decadebasis ingevoerd. Door de semi-analytische oplossingen van de differentiaalvergelijkingen is de numerieke oplossing in het model ongevoelig voor de lengte van de tijdstap.</p> <p>b) Het model heeft geen optie voor stationair rekenen. Het model kent behalve tijdstappen ook tijd (Julian daynumber) ivm berekening van bodemtemperatuur, opname van N en P door het gewas, etc.</p> <p>c) Het model kent een aantal stoffenpools waarvan de grootte niet is in te schatten op basis van veld- of laboratoriumgegevens. De omvang van en de verdeling over deze stoffenpools kunnen wel in belangrijke mate de uitkomsten in de toekomst beïnvloeden. Daarom wordt vaak een initialisatieprocedure toegepast. Vanaf een</p>



	bepaald tijdstip in het verleden (bijv. 1941) wordt met het historische landgebruik (bemesting en gewasopname) een simulatie uitgevoerd tot het moment waar toetsingsgegevens bekend zijn: meestal het heden.
Ruimtelijke schematiseringsvorm:	Bodemkolom wordt in rekencompartimenten. De lengte-eenheden worden in m's opgegeven. Maaiveld wordt gedefinieerd als 0-niveau. Boven het maaiveld bevindt zich de zg. 0-laag, waarin water en stoffen tijdelijk geborgen kunnen worden.
Schematisering van stoffen	Vaste organische stof (verdeeld over meerdere fracties) Opgelost organische stof Vaste organisch N; Opgelost organisch N; NH_4 ; NO_3 Optioneel: Vaste organisch P; Opgelost organisch P; PO_4
Technische aspecten	
Programmeertaal:	Fortran 77
Platform (DOS/Windows, Unix,...):	Dos
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil:	Geïntegreerd met routines voor invoer- en uitvoer.
Voor- en nabewerking:	Losse programma's
Kwantiteit	
Invoer:	Alle termen van de waterbalans, per tijdstap en per rekencompartiment uitgerekend met SWAP, MOZART of SIMGRO, opgeslagen in SWATRE.UNF- of WATBAL.UNF-files. Informatie tav de onderlinge afstand van ontwateringsmiddelen en de opbouw van de geohydrologie
Uitvoer:	Balansen per zelf te kiezen tijdsinterval, tijdreeksen van toestandsvariabelen snelheden per dag
Kwaliteit	
Invoer:	Toedieningen van organische materialen, meststoffen en plantenresten; Droge en natte depositie van N en P; randconcentraties in kwel en infiltrerend oppervlaktewater. Informatie tav grondgebruik: tijdstippen en diepte van grondbewerking, aantal grazende grootvee-eenheden.
Uitvoer:	Balansen van org.stof, N en P per zelf te kiezen tijdsinterval en zelf te kiezen diepte en tijdreeksen van toestandsvariabelen en enkele afgeleide toestandsvariabele (Pw, Pox en PAL) voor alle rekenlagen

Voorziene activiteiten bij implementatie in SRW

1. Splitsing van de code in drie delen: 1) Voorbereiding+bewerking tijdsonafhankelijke invoer; 2) dynamische simulatie per tijdstap + save van de toestandvariabelen en procesparameters; 3) bewerking van de output. Geschatte inspanning: 5 dagen.
2. Ontwerp, implementatie van de interface/wrapper waarbij ANIMO als gebiedsmodel functioneert (meerdere plots), dus inclusief GONAT functionaliteit; Reorganisatie van de invoer. Geschatte inspanning: 12 dagen.
3. Opstellen testplan + test in een lokale omgeving (gebied met 10 plots met verschillende condities) + herstel. Geschatte inspanning: 8 dagen



4. Documentatie van de code, het gewrapte model, het testplan en de testresultaten. Geschatte inspanning: 4 dagen.

Totaal geschatte inspanning: 29 dagen.

3.2.7 Stone

STONE (Samen Te Ontwikkelen Nutriënten Emissie model) is een initiatief van RIZA, RIVM en DLO om te komen tot een gemeenschappelijk uit- en afspoelingsmodel voor N en P op landelijke en zo mogelijk regionale schaal.

STONE1.3 is een modelketen van de modellen CLEAN, OPS/SRM en GONAT/ANIMO, de bijbehorende vaste invoergegevens en een aantal basisscenario's. STONE1.3 is geïmplementeerd als een client-server applicatie. Via een gebruikersinterface op een Windows'95/NT machine in een netwerk (de client) wordt de modelketen door een server-applicatie op een zware Windows-NT machine aangestuurd. De communicatie geschiedt via internetprotocollen.

De modellen CLEAN, OPS/SRM en GONAT/ANIMO zijn "as is" opgenomen in STONE1.3. De reden hiervoor is een eenvoudige inpassing in STONE van nieuwe, verbeterde modelversies. Gevolg hiervan is wel, dat deze modellen alle werken met een eigen ruimtelijke resolutie, en soms ook met andere massa- of volume-eenheden. Verborgen voor de gebruiker vinden daarom tijdens het draaien van de modelketen ruimtelijke en data-conversieslagen plaats. Dit geldt ook bij het bekijken van de modeluitvoer. De basisscenario's zijn gedefinieerd in de vorm van invoerbestanden voor het model CLEAN, en een beperkt aantal parametersettings voor OPS/SRM en GONAT/ANIMO. CLEAN-invoerfiles zijn gedefinieerd op het niveau van LEI-regio's. OPS/SRM invoerbestanden hebben betrekking op een 5*5 km² grid. De vaste invoergegevens voor GONAT/ANIMO zijn overeenkomstig de Water Systeem Verkenningen (WSV)-schematisatie en omvatten ook de resultaten van hydrologische berekeningen uitgevoerd in het kader van de Watersysteemverkenningen. Alle scenario's beginnen op 1 januari 1986 en hebben een simulatieduur van een veelvoud van 15 jaar (dus 15 jaar, 30 en/of 45 jaar).

Momenteel zit alleen de SRM in STONE. Aangezien er geen verschil is tussen de aanroep en het formaat van de resultaten tussen SRM en OPS zijn deze twee modellen in principe uitwisselbaar. De verschillen en overeenkomsten tussen deze twee modellen zijn opgenomen in de gebruikershandleiding van STONE1.0 (Beusen et al., 1998). We schrijven in deze documentatie echter nog steeds OPS/SRM, omdat het uitwisselen van deze modellen wel technisch mogelijk is, maar we dit momenteel in praktijk niet doen.

Ook is er een spraakverwarring rondom de benaming van GONAT/ANIMO. GONAT is in feite alleen een schil om ANIMO heen die een aantal invoer en uitvoer bestanden klaar zet voor ANIMO. Kijk voor meer informatie over deze verschillen/overeenkomsten in paragraaf 3.5.

De GUI is ontwikkeld in Delphi 4.0 en maakt gebruik van de volgende bibliotheken in de vorm van DLL's:

ggl32.dll: Geolib bibliotheek.

Tsplitter2: Voor een splitter (schuif waarmee je windows van grootte kan



veranderen).

Toolbar97 Voor de toolbar in Office 97 look.

:

TCPIP: Diverse TCPIP componenten, hiervan worden MAIL en de SMTP component gebruikt voor het verzenden van mail naar de beheerder.

De conversieprogramma's op de server zijn alle ontwikkeld in Borland C++ 5.01. De SMI is ontwikkeld in Borland C++ Builder 3.0. Deze stap is gezet omdat de componenten van Borland C++ 5.01, die de database openen en sluiten, een memory leak hebben.

Voor de ontwikkelomgeving is nodig:

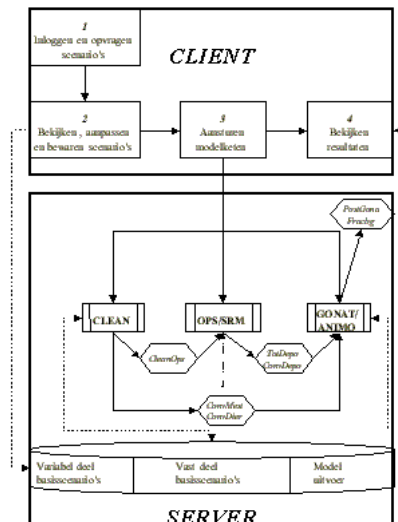
1. Pentium PC met minimaal 128 Mb intern. Het is voornamelijk het conversieprogramma Convmet dat momenteel 50 Mb vraagt. Minimaal 6 Gb harddisk is aan te raden. De programmatuur heeft een maximale tijdelijke harde schijfruimte van 1 Gb nodig (run 45 jaar) om te draaien. Voor andere simulaties is minder vrije ruimte nodig. Na het voltooien van een goede run, wordt het grootste deel weer opgeruimd. Per scenario van 45 jaar is 500 Mb aan harddisk opslag nodig, 30 jaar scenario ongeveer 300 Mb en voor 15 jaar 160 Mb.
2. WindowsNT, versie 4.0 met service pack 3 of 4. Dit was een uitgangspunt bij het bouwen van STONE1.0. De server is niet getest op andere besturingssystemen.
3. Delphi 4.0. De Grafische User Interface (GUI) is gemaakt met deze programmeertaal. De server gebruikt alleen een DLL van Delphi om mail te versturen naar de gebruiker.
4. Borland C++ 5.01. De conversieprogramma's en het netwerk protocol zijn allen in C++ geprogrammeerd.
5. Borland C++ Builder 3.0. De SMI is hierin geprogrammeerd.
6. Paradox 7.0 voor Window95 and WindowsNT. Paradox is een database programma. De SMI (Stone Model Interface) houdt in deze database bij welke scenario's er zijn, welke bestanden daar bij horen, wat de status is etc..
7. TCP/IP object. Dit wil zeggen dat de PC geconfigureerd moet zijn om TCP/IP protocol te kunnen gebruiken. Dit houdt tevens in dat er (natuurlijk) een netwerk aanwezig moet zijn, waarop de PC is aangesloten.

Voor de beheersomgeving van de server is nodig:

- Pentium PC met minimaal 256 Mb intern geheugen en minimaal 6 Gb hard disk ruimte. De huidige basisscenario's hebben minimaal 3 Gb hard disk ruimte nodig en men heeft minimaal 1 Gb aan 'scratch ruimte' nodig. Geadviseerd wordt een beschikbare hard disk ruimte van 18 Gb, die standaard gecompriemd wordt door Windows NT.
- WindowsNT 4.0 (service pack 3 of 4). Op andere systemen is STONE niet getest.
- TCP/IP object. Dit wil zeggen dat de PC geconfigureerd moet zijn om TCP/IP protocol te kunnen gebruiken. Dit houdt tevens in dat er (natuurlijk) een netwerk aanwezig moet zijn, waarop de PC is aangesloten.

- Een tool om de SMI database aan te passen

De processen die gedurende een STONE-sessie worden doorlopen zijn gesimplificeerd weergegeven in figuur 1.



De modelketen begint meestal met CLEAN maar kan ook beginnen met OPS/SRM of met GONAT/ANIMO, indien het voorafgaande deel van de keten reeds eerder voor het actuele scenario zijn doorgerekend. Tussen de modellen vinden de dataconversies plaats.

Het CLEAN model berekent emissies van ammoniak naar lucht en van mineralen en zware metalen naar bodem van de veestapel in Nederland op een ruimtelijk aggregatieniveau van 31 mestgebieden, ook wel LEI-regio's genoemd.

Het model wordt geheel door externe invoer gestuurd, het bevat zelf geen getallen. Door de invoer aan te passen kan men b.v. voor diverse jaren, stoffen, diersoorten, staltypen, mestsoorten, mestaanwendings-technieken, gewassen en bodemsoorten een berekening maken. De invoer bestaat uit 1 invoerfile die aan een strikt formaat moet voldoen. and van CLEAN opvragen bij de beheerder.

Het OPS/SRM model is bedoeld voor de berekening van periodegemiddelde concentraties en deposities op lokale tot nationale schaal veroorzaakt door individuele lokale bronnen tot aan geaggregeerde bronnen aan de grenzen van Europa.

Momenteel zit alleen de SRM in STONE. Aangezien er geen verschil is tussen de aanroep en het formaat van de resultaten tussen SRM en OPS zijn deze twee modellen in principe uitwisselbaar. De verschillen en overeenkomsten tussen deze twee modellen zijn opgenomen in de gebruikershandleiding van STONE1.0 (Beusen et al., 1998). We schrijven in deze documentatie echter nog steeds OPS/SRM, omdat het uitwisselen van deze modellen wel technisch mogelijk is, maar we dit momenteel in praktijk niet doen.

Het model ANIMO berekent de uitspoeling van N en P naar grond- en oppervlaktewater bij verschillende bodemkundige, hydrologische en landbouwkundige grondgebruikssituaties. Voor de toepassing van ANIMO zijn hydrologische gegevens nodig die door een extern waterkwantiteitsmodel worden berekend. Het model heeft opties voor de koppeling aan (agro-) hydrologische perceelsmodellen zoals SWAP, DEMGEN, MOZART en regionale grondwaterstromingsmodellen zoals SIMGRO. Deze waterbalansgegevens worden per tijdstap voor het perceel of per subgebied en per grondgebruiksvorm ingelezen. Gepoogd is om in het model ANIMO de belangrijkste processen die een rol spelen in de stikstof-, de fosfor- en de organischestofkringloop kwantitatief te beschrijven. In STONE1.3 is versie 3.7 van ANIMO ondergebracht.



Het instrument GONAT (Geografisch geOriënteerde NATionale simulaties met ANIMO 3.5) is ontwikkeld om op nationale schaal de uitspoeling van nutriënten te berekenen met het model ANIMO. Het model ANIMO wordt toegepast op perceelsschaal. Om met ANIMO nationale berekeningen uit te voeren moet Nederland eerst ruimtelijk worden geschematiseerd in 'uniforme' gebieden (plots). Vervolgens moet ANIMO voor elk plot apart worden gedraaid. GONAT is een schil rondom ANIMO en organiseert de juiste ruimtelijke in- en uitvoergegevens voor elk plot en roept ANIMO aan.

GONAT heeft als belangrijkste functies:

- 1) voorbereiden van gegevens;
- 2) aanroepen van ANIMO met een set van invoerfiles;
- 3) nabewerken van resultaten.

1) Voorbereiden van gegevens

Belangrijke functies in GONAT zijn o.a. het verdelen van organische stof uit dierlijke mest over de organische stof fracties in ANIMO. Elke organische stof fractie heeft zijn eigen karakteristieke afbraaksnelheid, stikstofgehalte en fosforgehalte. Verder wordt de gemiddelde depositie per regio aangepast voor de betreffende landgebruikvorm van een plot. Plots met veen als grondsoort worden apart behandeld. GONAT zorgt ervoor dat de verticale schematisatie van een plot wordt aangepast wanneer zakking van het maaiveld optreedt als gevolg van oxidatie van organische stof.

2) Aanroepen van ANIMO met een set van invoerfiles

GONAT vult de invoerfiles van ANIMO met de juiste geografische gegevens van een plot en roept ANIMO aan.

3) Nabewerken van resultaten

De uitvoerfiles van ANIMO worden ingelezen. GONAT aggregaat de resultaten in ruimte en in tijd. Alle balanst termen van de verschillende stoffen worden per plot op jaarbasis weggeschreven.

Het instrument GONAT is toegepast in een onderdeel van het project 'watersysteemverkenningen' (WSV) van het RIZA. Met behulp van GONAT zijn de effecten onderzocht van verschillende mestbeleidsscenario's op de uitspoeling van stikstof en fosfor vanuit het landelijk gebied naar het oppervlaktewater. Voor meer informatie wordt verwezen naar Boogaard en Kroes (1997).

CLEAN

CLEAN heeft als invoerbestand Cleanin.dat en als uitvoerbestand Cleanuit.dat. Datatransport tussen de twee submodellen van CLEAN vindt plaats via het bestand Cleantmp.dat. Het formaat van deze bestanden wordt beschreven in appendix 4. CLEAN rekent in 1 run de gehele simulatieperiode door.

OPS/SRM

OPS en SRM werken beide met dezelfde in- en uitvoerbestanden. OPS rekent in 1 run altijd 1 jaar door. Dus voor een simulatieperiode van 15 jaar worden er 15 uitvoer bestanden aangemaakt. Voor een beschrijving van de in- en uitvoerbestanden wordt verwezen naar Van Jaarsveld (1989). Onderstaande tabel geeft een overzicht van de gebruikte bestanden.

Bestand door STONE	 Aansturing door	 Omschrijving
---------------------------	--------------------------	-----------------------



gebruikt	SMI	
emiss###.brn	Ja	Invoerbestand, emissies NH ₃
ops###.ctr	Ja	Invoerbestand, stuurfile
nh3dep###.plt	Ja	Uitvoerbestand, deposities NH ₃
tmp.lpt	Ja	Uitvoerbestand voor printer
###: 2-digit cyclusnummer met 01 voor het eerste simulatiejaar, 02 voor het tweede simulatiejaar enz.		

GONAT

GONAT kent een groot aantal in- en uitvoerbestanden. De formaten van deze gegevens zijn beschreven in Boogaard en Kroes (1997). GONAT rekent met periodes van 15 jaar. Vandaar dat de simulatie periode van STONE een veelvoud van 15 jaar is. Onderstaande tabel geeft weer, welke bestanden binnen STONE worden gebruikt.

Bestand GONAT- handleiding	Bestand door STONE gebruikt	Aansturing door SMI	Omschrijving
Bo_d0000.dat	bo_d0000.dat, bo_l0000.dat en bo.dat	ja	Invoerbestand, grondgebruiksgegevens
Botnut.dat	botnut.dat	Nee	Invoerbestand, onderrandvoorwaarden N, C, P
Chempar.inp	chempar.inp	Nee	Invoerbestand ANIMO, sorptieparameters P
Cr_d0000.dat	cr_###.dat	Ja	Invoerbestand, correctiefactoren tov depositie 1993
Cornutop.dat	cornut###.dat	Ja	Invoerbestand, correctiefactoren tov N, P-concentraties aangevoerd oppervlaktewater
Dm_d0000.dat	dm_ori.dat	Ja	Invoerbestand (origineel), niveau en samenstelling dierlijke mest
	dm_###.dat	Ja	idem, bewerkt door ConvMest en ConvDier
	dm_tmp###.dat	Ja	idem, tijdelijk tussen ConvMest en ConvDier
Gen_d.dat	gen_###.ctr	Ja	Invoerbestand, algemene gegevens
Iniplot.inp	init_###.inp	Nee	Invoerbestand ANIMO, initiële toestand N, P
	init_###.out	Ja	Uitvoerbestand tevens dienend als initial.inp nieuwe cyclus
Km_d0000.dat	km_###.dat	Ja	Invoerbestand, niveau kunstmest
Latnut.dat	latnut.dat	Nee	Invoerbestand, laterale randvoorwaarden N, C, P
Material.inp	material.inp	Nee	Invoerbestand met materiaaleigenschappen
Maxroot.dat	maxroot.dat	Nee	Invoerbestand, max. wortellengtes
Mm_d0000.dat	mm_*0000.dat	nee	Invoerbestand, toedieningsregime (kunst)mest

Plant.dat	plant.dat	ja	Invoerbestand, gewasparameters
Plot.dat	plot.dat	ja	Invoerbestand, plotkarakteristieken (schematisatie)
Soil.dat	soil.dat	ja	Invoerbestand, bodemfysische eenheden
Swat.dat	swat.dat	nee	Invoerbestand, gesimuleerde hydrologie
Topnut.dat	Topn_###.dat	ja	Invoerbestand (origineel), depositie per PAWN-district, bewerkt door ConvDepo
Ba_d?????.out	ba_d?????.out	nee	Uitvoerbestand, alle balanst termen per plot, jaar en profieltype
Distmnth.out	dist_###.dat	ja	Uitvoerbestand, subset balanst termen per PAWN-district, maand en profieltype in referentiejaar
Plot_dec.out	dec_###.dat	ja	Uitvoerbestand, alle balanst termen per plot en decade voor een 7 meter profiel in referentiejaar
Crop_red.out	crop_###.dat	ja	Uitvoerbestand, verminderde gewasproductie door stress per plot, jaar

##: 2-digit cyclusnummer, met 01 voor de eerste 15 jaar, 02 voor de tweede 15 jaar enz.

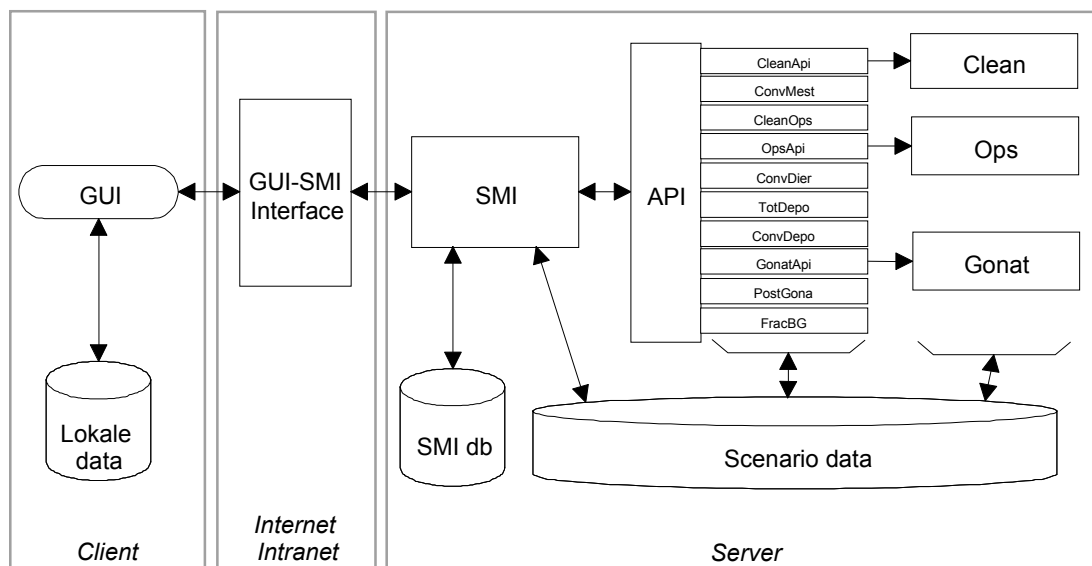
*: letter l,m,n,p of y

????: jaartal

Voor de dataconversie tussen de verschillende deelmodellen worden een reeks bestanden gebruikt.

Systeemarchitectuur

In de onderstaande figuur is de architectuur van STONE weergegeven.



De gebruiker maakt gebruik van de GUI voor het opvragen, bekijken en, indien van toepassing, wijzigen van scenario's, parameter-instellingen en resultaten.

Lokaal heeft de GUI data om het data-verkeer niet onnodig extra te belasten, zoals de bestanden voor de geografische indelingen van LEI,



PAWN en WSV. Verder heeft de GUI lokaal instellingen van de gebruiker, zoals de ingestelde klassegrenzen en kleuren van de legenda's.

De GUI communiceert via een tussenlaag, de GUI-SMI interface, met de SMI. Deze tussenlaag kent een implementatie aan zowel de client- als aan de serverzijde. De namen van de aangeroepen functies beginnen allemaal met STONE_.

De SMI houdt in een database, SMI db, bij welke scenario's er zijn, welke bestanden daar bij horen, wat de status is etc. De SMI verzorgt ook het inlezen van parameters uit de bestanden t.b.v. de GUI. Alle parameters zijn opgeslagen in bestanden, in de figuur is dit aangegeven is als Scenario data.

Als er een proces gestart moet worden roept de SMI op haar beurt weer de API aan waar interface functies gedefinieerd zijn voor o.a. het starten en stoppen van processen. De namen van de functies die in de API aangeroepen kunnen worden beginnen allemaal met STONEAPI_. De API van een bepaald proces is als programma aanwezig als DLL.

In de DLL van de betreffende API kan vervolgens een programma aangeroepen worden, zoals bij de procesmodellen (Clean, Ops, Gonat), of de benodigde berekening kan integraal opgenomen zijn in de DLL. Het laatste is het geval bij alle data conversie routines en postprocessen.

3.2.8 Mozart

Modelomschrijving

Het hydrologische model MOZART (Model voor Onverzadigde Zone voor landelijke Analyses en Regionale Toepassingen) is in de periode 1991-1995 is ontwikkeld. Het doel van MOZART is het berekenen van de verticale stroming van water door de onverzadigde zone, de grondwaterstand en de interactie tussen de onverzadigde zone en het oppervlaktewater (drainage of infiltratie). Daarnaast wordt binnen het model een water- en conservatieve stofbalans bijgehouden van het oppervlaktewater.

Modelconcept

MOZART kent twee berekeningsmethoden voor de stroming door de onverzadigde zone, t.w. een quasi niet-stationaire en een niet-stationaire methode. De quasi niet-stationaire methode is geschikt voor wanneer een groot ruimtelijk detail is vereist en het aantal benodigde hydrologische variabelen relatief beperkt is. Met de niet-stationaire methode kunnen veel meer hydrologische variabelen worden berekend (vochtgehaltes en fluxen voor een groot aantal verticale bodemsegmenten) en deze kent een groot detail in de tijd. De laatste methode vraagt veel meer rekentijd waardoor het ruimtelijk detail, zeker voor landelijke berekeningen, beperkt is. Deze methode is meer geschikt voor toepassingen m.b.t. de grondwaterkwaliteit. De rekeneenheid in MOZART is de plot, dat is een bodemkolom bestaande uit een wortelzone en een ondergrond, waaraan bodemfysische eigenschappen, gewastype, kwelflux, drainagetoestand en meteorologie is toegekend. In het model vindt geen horizontale stroming tussen plots plaats, wel tussen de plot en het kleine oppervlaktewater.



De bovenrandvoorwaarde wordt gevormd door de neerslag en de referentieverdamping (op decadebasis). De interactie tussen het grond- en oppervlaktewater wordt berekend aan de hand van basisdrainagefuncties. Hierin worden meerdere typen ontwateringsmiddelen onderscheiden. De onderrandvoorwaarde (kwelflux) is afkomstig van NAGROM (Nationaal Grondwater Model) en wordt via het koppelingsconcept MONA (MOZart-NAgrom koppeling) aan MOZART geleverd.

De interactie tussen de wortelzone en de ondergrond wordt berekend op een quasi-niet-stationaire wijze, d.w.z. op decadebasis wordt de stationaire toestand bepaald. Hierbij wordt op een iteratieve manier gezocht naar een combinatie van capillaire opstijging of wortelzone verlies, vochttekorten in de wortelzone en ondergrond, grondwaterstand en vochtspanning op het grensvlak wortelzone-ondergrond.

Met MOZART kan tevens de verdeling van oppervlaktewater op landelijke schaal berekend worden door koppeling met het Distributiemodel (DM). De berekening onderscheidt twee fasen, n.l. een vraagfase en een toewijzingsfase. In de vraagfase wordt de watervraag vanuit het landelijk gebied en de diverse watervragers (landbouw, industrie en drinkwater) berekend. Daarna wordt op basis van deze vraag m.b.v. DM de optimale waterverdeling bepaald (toewijzingsfase), waarbij in geval van watertekorten gevraagde debieten kunnen worden gekort.

De semi-stationaire versie van MOZART heeft het model ook een niet-stationaire berekeningsmethode ten behoeve van waterkwaliteitsberekeningen. Deze module is echter door tijdsdruk (o.a. activiteiten t.b.v. WSV) nog niet verder geoptimaliseerd en toegepast.

Toepassingen:

Sinds het gereedkomen van het model is de semi-stationaire versie MOZART toegepast bij de berekeningen ten behoeve van de Landelijke Watersysteemverkenningen (WSV) en de Vierde Nota Waterhuishouding (NW4) en de NOP-studie (Nationaal Onderzoeksprogramma Klimaatveranderingen). Daarnaast is MOZART ook toegepast voor regionale studies, zoals de GGOR-studie (Gewenste Grondwater Situatie) voor de provincie Noord-Brabant en de WSV-studie voor de provincie Friesland. Tijdens de Landelijke WSV-studie is een koppeling tot stand gebracht tussen MOZART en NAGROM (MONA). Voor dit koppelingsconcept is inmiddels een apart project gedefinieerd. In 1997 is gewerkt aan een goede koppeling tussen MOZART en het Distributie MODEL (DM). Voor landelijke berekeningen is MOZART niet of slechts globaal getoetst. Voor de regionale studie (GGOR-Nd.Brabant) is het model wel gecalibreerd. Daarnaast zijn in het kader van de GGOR-studie enkele concepten verbeterd.

De bedoeling is om zo spoedig mogelijk een goed draaiende en ook goed gedocumenteerde landelijke versie (inclusief een landelijke schematisatie) te hebben waarmee direct landelijke berekeningen gedaan kunnen worden door medewerkers van WSL, inhuurkrachten of evt. door een ingenieursbureau. De begeleiding door WSG moet dan minimaal kunnen zijn.

Ook voor regionale studies dient er een goed werkende en goed gedocumenteerde versie gereed te liggen die direct ingezet kan worden.

**Modelinvoer**

T.b.v. de schematisatie op plotniveau wordt gebruik gemaakt van de volgende (landsdekkende) bestanden:

- het LGN (Landelijk Grondgebruiksdatabase van Nederland (LGN-2 en over enige tijd het LGN-3);
- de bodemfysische eenheden, afgeleid van de bodemkaart 1:250.000;
- de bodemfysische tabellen (pF- en k-H-relaties afkomstig uit de Staringreeks);
- de meteorologische gegevens van het KNMI;
- de landelijke dataset met oppervlaktewatergegevens, afgeleid uit het WIS.

De ruimtelijke schematisatie van de plotbestanden wordt aangemaakt in MONA (de koppelings-interface tussen MOZart en NAGrom).

Voor de oppervlaktewater berekeningen wordt gebruik gemaakt van de volgende invoergegevens:

- districten (deze komen overeen met de 80 PAWN-districten)
- afwateringseenheden (deze zijn afgeleid uit het WIS)

Modeluitvoer

Als uitvoer levert MOZART de hydrologische gegevens voor de effect-modellen DEMNAT en AGRICOM.

Voor DEMNAT(Dosis Effect Model Natuur Terrestrisch) levert MOZART:

- de (verandering in) GVG op plotniveau;
- de (verandering in) het oppervlaktewaterpeil op plotniveau;
- de (verandering in) kwel op plotniveau
- (de verandering in) het percentage systeemvreemd water per afwateringseenheid;
- (de verandering in) de chloride-gehalte per afwateringseenheid

Voor AGRICOM (AGRIcultural Cost Model):

- de GHG en de GLG voor de bepaling van de droogte- en natschade met de IKC-tabellen op plotniveau;
- de beregeningsgiften voor het bepalen van de kosten van beregening op plotniveau

Modelkoppelingen:

- Distributiemodel: reeds beschikbaar
- NAGROM: beschikbaar via MONA
- DEMNAT: beschikbaar
- SOBEK: beschikbaar
- SMART2: beschikbaar

(Toekomstige) Ontwikkelingen:

- GUI (1997-2000, beschikbaar)
- flexibilisering temporele resolutie (ten minste van decade naar dag-berekeningen)
- flexibilisering, detailering ruimtelijke resolutie
- onderzoek en implementatie van nieuwe concepten



Relatie met SRW:

MOZART vormt een spil in het modelinstrumentarium voor landelijke beleidsstudies. Vanuit inhoudelijk perspectief is het dientengevolge een belangrijke modelcomponent voor migratie naar het SRW. Door de hoeveelheid reeds gerealiseerde koppelingen is ruime kennis over de moeilijkheid van koppelingen beschikbaar. Bij een migratie naar het SRW kan de koppeling met andere modellen in het SRW kan uitgevoerd worden via de plots: elke plot is een rekenpunt. Via een aggregatiemodel kan dan ook gekoppeld worden met modellen met een hogere (lagere) ruimtelijke resolutie.

Binnen SRW wordt sterk de nadruk op flexibele ruimtelijke en temporele resoluties gelegd. De flexibilisering is in het huidige MOZART programma een prominent item.

Een van de aspecten van SRW die in toekomst opgepikt moeten worden in SRW kader is een "generieke GUI". De GUI van MOZART is door de complexiteit van MOZART eveneens uitgebreid en complex. Het verdient daarom aanbeveling om de MOZART GUI bij de komende ontwikkeling van een SRW-ModelGUI in detail te betrekken.

Kerngegevens:

Algemene kenmerken	
Naam model	MOZART - Model voor Onverzadigde Zone voor landelijke Analyses en Regionale Toepassingen
Eigenaar	RIZA
In beheer bij	Source: RIZA Documentatie en GUI: IQUIP Basisgegevens: Bronhouders
Laatste versie	1.2 R
Inhoudelijke aspecten	
Doel	het berekenen van de verticale stroming van water door de onverzadigde zone, de grondwaterstand en de interactie tussen de onverzadigde zone en het oppervlaktewater (drainage of infiltratie).
Compartimenten	kwantiteit onverzadigde zone
Tijdeenheid	decade
Schematisatievorm	basis grid; afwateringseenheden
Technische aspecten	
Programmeertaal	C (schil: Java 1.1)
Platform (Dos/Windows/Unix)	PC/UNIX
Apart rekenhart/geïntegreerd met schil	Gescheiden
Voor- en nabewerking	Beschikbaar
Kwantiteit	
Invoer	<ul style="list-style-type: none"> het LGN (Landelijk Grondgebruiksdatabase van Nederland (LGN-2 en over enige tijd het LGN-3); de bodemfysische eenheden,



	afgeleid van de bodemkaart 1:250.000; • de bodemfysische tabellen (pF- en k-H-relaties afkomstig uit de Staringreeks); • de meteorologische gegevens van het KNMI; • de landelijke dataset met oppervlaktewatergegevens, afgeleid uit het WIS. • districten (deze komen overeen met de 80 PAWN-districten) • afwateringseenheden (deze zijn afgeleid uit het WIS)
Uitvoer	• de (verandering in) GVG op plotniveau; • de (verandering in) het oppervlaktewaterpeil op plotniveau; • de (verandering in) kwel op plotniveau • (de verandering in) het percentage systeemvreemd water per afwateringseenheid; • (de verandering in) de chloride-gehalte per afwateringseenheid • de GHG en de GLG voor de bepaling van de droogte- en natschade met de IKC-tabellen op plotniveau; • de berekeningsgiften voor het bepalen van de kosten van berekening op plotniveau
Kwaliteit	
Invoer	niet van toepassing
Uitvoer	niet van toepassing (N.B. wel chloride)

Modeldocumentatie

De belangrijkste documentatie is:

- RIZA, 1995. Functioneel Detailontwerp MOZART
- RIZA, 1995. Technisch Detailontwerp MOZART
- RIZA/WL, 1996. Beschrijving landelijke dataset MOZART, Lelystad

Verder zijn rapporten over de volgende onderwerpen beschikbaar:

- definitiestudie
- basisontwerp
- realisatie;
- invoering
- gebruik en beheer

Overig

- Bij de ontwikkeling is gebruik gemaakt van SDM (Software Development Methodology)
- Contactpersonen: Geo Arnold en Timo Kroon (RIZA/WSG)



3.2.9 GTM: Geïntegreerd Transportmodel

In het GTM (zie Bijlage B), zijn de volgende modellen op het gebied van Grondwaterkwaliteit beschikbaar: PHREEQC, BIODIG, FATE, ISOTHERM en MultiMT3D tezamen met MODCHEM.

Gebaseerd op de kwantitatieve gegevens van een 3D Modflow model worden de flow-parameters gebruikt door MultiMT3D, waarna het verloop van diverse organische en anorganische stoffen door de ondergrond wordt doorgerekend.

Gevraagd wordt welke consequenties het omzetten van dit raamwerk heeft indien de architectuur van het standaard raamwerk water gebruikt wordt.

Een interessante optie is, dat bij verdere implementatie van het SRW, het GTM kan vervallen en vervangen wordt door SRW-koppelingen

Dimensionering

Momenteel wordt binnen het SRW vooral de koppeling van twee-dimensionale watermodellen op het aardoppervlak uitgewerkt. Er worden (nog) geen gereedschappen voor drie-dimensionale modellen ontwikkeld. ModFlow en de andere genoemde modellen bestrijken echter een drie-dimensionaal gedeelte van de aardbodem, welk in gelijkvormige ruimtelijke elementen onderverdeeld is.

(Daarnaast zijn enkele van bovenstaande modellen zijn volgens het vakjargon 2, 5 D, dat wil zeggen dat de ondergrond niet is onderverdeeld in geometrische elementen, maar verticaal is onderverdeeld in lagen, waarbij de berekening per laag plaatsvindt. De exacte verticale positie van een laag is dan zelfs onbelangrijk, mis de in- en uitgangpositie en het doorlaatvermogen van de laag maar vast ligt.)

Conclusie: Uit ervaring blijkt dat een tool nodig is, waar aan het oppervlak een grid ontworpen en getekend kan worden, waarna in een aparte user-interface de verticale onderverdeling wordt uitgewerkt

Modelontwerp voor kwantitatieve modellen

Een ander punt van aandacht is het aantal aan te sturen elementen. Een eenvoudig 3D-model van 100x100 elementen en x lagen kent al 10.000 knooppunten aan het oppervlak, welke niet handmatig aangestuurd of gekoppeld kunnen worden. Gewoonlijk zal men niet twee ruimtelijke modellen op een zijvlak aan elkaar koppelen, doch voor het geheel een nieuw model ontwerpen. Hoogstens kunnen globaal aangegeven fluxen per laag worden doorgegeven. Men koppelt dan geen punten, maar lagen. Indien men overlappende modellen met verschillende schaal wil koppelen is het een vereiste dat de scheidende structuren tussen de lagen overeenkomen. Dit betekent dat men vooraf de ruimtelijke indeling kiest, die in beide modellen gebruikt gaat worden. Achteraf koppelen is onverstandig aangezien dan ingewikkelde herverdelingen nodig zijn. Dit in tegenstelling tot het SRW, waar de ruimtelijke model-schema's afzonderlijk beschikbaar zijn en naderhand handmatig gekoppeld kunnen worden

Conclusie:..

Het is gebruikelijk dat men een nieuw geometrisch model ontwikkelt, als twee naburige modellen gekoppeld bestudeerd moeten worden.

Ook overlappende modellen met verschillende schalen moeten vooraf gedimensioneerd worden..



Modelontwerp voor de relatie tussen kwantitatieve en kwalitatieve modellen

De genoemde chemische en biologische waterkwaliteitsmodellen zijn gebaseerd op de ruimtelijke indeling en berekende stroming uit ModFlow. Hierbij gaat men uit van het geometrisch ontwerp en de stromingsparameters zoals die uit de kwantitatieve modellen komen. Op elke cel worden daarna een aantal biologische of chemische omzettingen losgelaten, waarbij gezorgd wordt dat de massabalans in evenwicht blijft. De uitgangspunten en condities vooraf, bijvoorbeeld de aanwezigheid van bufferende stoffen of zouten wordt niet per cel toegekend, maar gewoonlijk tegelijk aan een oppervlak van een laag. Daarna vindt de doorberekening van de matrix plaats.

Conclusie: Een gereedschap om over grote gebieden eigenschappen aan lagen toe te kennen kan het gebruik vereenvoudigen.

Tijdstappen

Bij de berekeningen wordt ervan uitgegaan dat de omgevingsparameters per stressperiode vast liggen. Modellen in de ondergrond zijn zeer afhankelijk van de randvoorwaarden en rekenen met relatief lange tijdsperioden. Het is onwaarschijnlijk dat een bestaand model een tijdstap-indeling gebruikt welke gemakkelijk over te nemen is door een ander model. Het tijdstappen-ontwerp is dus afhankelijk van de overkoepelende structuur en koppeling veroorzaakt meestal een herontwerp op dit gebied.

Conclusie: Het is gebruikelijk dat de tijdstap-indeling opnieuw moet worden gekozen voordat koppeling tot stand kan komen. Daarna kunnen de in de tijd veranderende fluxen met de buitenwereld per model aan deze tijdstappen worden toegekend en dan kan het model pas gaan functioneren.

Tussentijdse opslag

Gezien de grote hoeveelheid gegevens, welke in 3D modellen verwerkt moeten worden, maakt men gebruik van matrixen voor tussentijdse dataopslag en wordt tussentijdse in- en export van gegevens zoveel mogelijk tegengegaan.

Conclusie: Performance wat betreft in- en uitvoer is zeer belangrijk voor werken met drie-dimensionale modellen.

Presentatie

Output en rapportage vindt zoveel mogelijk grafisch plaats, bijvoorbeeld met blok diagrammen en overzichtskaarten. Voor 2D presentatie is ArcView populair, gecombineerd met tijd-concentratie diagrammen.

Conclusie: Integreer de specifieke presentatietools, welke nu reeds op de markt zijn.

Koppeling 2D en 3D

Bij koppeling tussen oppervlakte en ondergrond modellen is gewoonlijk een tussenlaag nodig.

Oppervlaktemodellen rekenen gewoonlijk met vectorfluxen tussen punten, terwijl de verticale inzigging naar de ondergrond afhankelijk is van het doorstroomd nat aardoppervlak. Het is wenselijk een tool te hebben waar berekende wateroppervlakken per tijdstap zichtbaar zijn, tegelijk met het



onderliggende grid, zodat de toedeling van doorstroomd oppervlak aan de cellen automatisch berekend kunnen worden.

Voorstel: Integreer in de SRW-editor een (geo)grafisch analyse-tool om een overlay te maken tussen veranderende wateroppervlakken en een onderliggend grid. Handmatige toekenning tussen punten is tijdrovend en bewerkelijk.



4 Tot slot

In het voorliggende rapport zijn met name de modellen, die in de volgende fase van het project bij de implementatie van de basisvariant een rol spelen, in detail geanalyseerd. Op basis hiervan is voor de betreffende modellen een schatting gemaakt van de inspanning benodigd voor de implementatie in versie 1.0 van het Standaard Raamwerk Water.

Voor een aantal modellen die op termijn mogelijk in aanmerking komen voor opname in het Standaard Raamwerk Water (Mozart, Animo, Stone en GTM) is een analyse op hoofdlijnen voorzien.



5 Literatuur

[GMP99]

s.n., 1999, *Vloeiend Modelleren in het waterbeheer – Handboek Good Modelling Practice*, STOWA/RIZA, STOWA-raport 99-05, Utrecht, s.p.

[SRW-A]

van der Wal, T. (red.), 1999, “Architectuur Standaard Raamwerk Water”, ISBN 90.5773.065.0, Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer (STOWA), Utrecht, rapport 99.16, Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling (RIZA), Lelystad, rapport 99.063, Alterra, Wageningen, rapport 72, 116 p.

[SRW-FO]

Tacke, J. (EDS International BV), Brinkman, R. (WL | Delft Hydraulics), Frieswijk, E. (EDS International BV), Levelt, D. (WL | Delft Hydraulics), Otjens, T. (Alterra), 2000, SRW2000 Standaard Raamwerk Water – versie 1.0 Functioneel Ontwerp, ISBN 90-5773-140-1, Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer (STOWA), Utrecht, rapport 2001-28, Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling (RIZA), Lelystad, rapport 2001.038, MX.systems, Rijswijk, rapport P4118-R-1, 40 p.

[SRW-P]

s.n., 2000, Standaard Raamwerk Water. Projectplan, 28 april 2000, EDS, Alterra, Geodan IT, TNO, WL|Delft Hydraulics, 19p.

[SRW-PVA]

Noort, J. (red.), 2000, Plan van Aanpak Standaard Raamwerk Specificatie en Bouw versie 1, in opdracht van STOWA, Utrecht, 15p.

[SRW-PVE]

van Adrichem, B. (EDS), van Geer, F., Minnema, B. (NITG-TNO), Bakema, A. (RIVM), Ubbels, A., Terveer, R., van Baalen, S. (RIZA), Bulens, J. (Staring Centrum-DLO), Noort, J. (STOWA) en J. Stout (WL-Delft Hydraulics), 1998, Programma van Eisen Standaard Raamwerk Water, ISN 90-5773-136-3, Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer (STOWA), Utrecht, werkdocument 2001-W-03, Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling (RIZA), Lelystad, werkdocument 2001.124X, 16p.

[SRW-TO]

Tacke, J. (EDS International BV), Brinkman, R. (WL | Delft Hydraulics), Frieswijk, E. (EDS International BV), Levelt, D. (WL | Delft Hydraulics), Otjens, T. (Alterra), 2000, Standaard Raamwerk Water - versie 1.0 Technisch Ontwerp, ISBN 90-5773-142-8, Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer (STOWA), Utrecht, werkdocument 2001-W-06, Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling (RIZA),



Lelystad, werkdocument 2001.125X, MX.systems, Rijswijk, The Netherlands, werkdocument P4118-R-2.



Bijlage A Kenmerkende verschillen SOBEK-River en SOBEK-Rural

Binnen de SOBEK-familie is als eerste de rekenkern voor SOBEK-River ontstaan. Bij de ontwikkeling daarvan is voortgebouwd op de 1D-traditie bij Rijkswaterstaat, waarbij de waterbeweging wordt berekend met behulp van een 4-punts, 2^{de} orde Preissmann schema. Bij de verdergaande ontwikkeling van SOBEK voor toepassing op rioolstelsels bleek deze rekenmethode principieel problematisch te zijn en niet de robuustheid te garanderen die met een speciaal op basis van een *staggered* rooster door WL (Guus Stelling) ontwikkeld schema bewijsbaar was. Dit eerder genoemde Staggered Upstream schema of Delft schema heeft de basis gevormd voor de ontwikkeling van SOBEK-Urban en SOBEK-Rural. Hoewel in beginsel minder nauwkeurig (1^{ste} orde schema) is het staggered upstream schema in staat om probleemloos allerlei bijzondere stromingscondities te simuleren. Voorbeelden hiervan zijn:

- stroming over een, bij aanvang, droog kanaalbed;
- rekenen met open en gesloten leidingen, zowel leeg, gedeeltelijk gevuld als geheel gevuld;
- berekenen van super-kritische stroming (schietend water) en de overgang van schietend naar stromend water (watersprong);
- simulatie van verdrongen stroming inclusief overgang van en naar niet-verdrongen stromingssituaties.

Bij het staggered upstream schema kan de waterstand tijdens de berekening nooit (kunstmatig) door de bodem schieten; het dynamisch droogvallen en (weer) onderlopen van leidingen wordt nauwkeurig gesimuleerd. Het gebruik van het staggered upstream schema is ook rekentechnisch bijzonder efficiënt. Het systeem van vergelijkingen wordt opgelost door een algoritme op basis van netwerk structuurherkenning. Hiermee neemt de rekentijd voor simulaties van stroming in netwerken in veel gevallen slechts lineair toe met een toenemende grootte van het stelsel. Verder wordt de efficiëntie (rekensnelheid) vergroot door toepassing van een zelfselecterende tijdstap (wordt automatisch en dynamisch ingesteld, afhankelijk van de stromingstoestand).

Voor genoemde aspecten maakt het gebruik van SOBEK-Rural ook voor riviertoepassingen aantrekkelijk. Voor het operationeel inzetten moet SOBEK-Rural dan nog wel voorzien worden van specifieke 'rivierfunctionaliteit' zoals die nu wel in SOBEK-River beschikbaar is. Als belangrijkste features kunnen genoemd worden:

- onderscheid in een stroomvoerend en bergend deel van het dwarsprofiel en de mogelijkheid het stroomvoerende deel van het dwarsprofiel in subsecties (elk met een eigen ruwheid) te verdelen;
- zomerkade-optie (het in de berekening betrekken van het onderstromen van de uiterwaarden bij overstromen van de zomerkade en het geleidelijk weer leeglopen bij dalende waterstand);
- verbeterde sturing van kunstwerken;
- rekenen met harmonische randvoorwaarden (getij- en Fouriercomponenten);
- koppeling met sedimenttransport en morfologie;
- berekening van zoutindringing, inclusief het effect van dichtheidsverschillen op de stroming.



Tot slot moet nog als kenmerkend verschil tussen SOBEK-River en SOBEK-Rural het verschil in modelschematisatie worden genoemd. Op het niet-staggered rooster van SOBEK-River zijn alle variabelen (A, C, H, Q, enz.) op hetzelfde gridpunt gedefinieerd. Binnen een tak lopen de gridpunten op volgorde van de coördinaatrichting. Op het begin- en eindpunt van de tak zijn ook gridpunten gedefinieerd. Het staggered rooster van SOBEK-Rural daarentegen onderscheidt twee typen gridpunten, namelijk H-punten en Q-punten. Deze liggen niet op dezelfde plaats. De meeste variabelen (A, C, H, enz.) zijn op H-gridpunten gedefinieerd; sommige zoals het debiet Q op de Q-punten. De Q-punten liggen tussen de H-punten in. Op het begin- en eindpunt van de tak zijn alleen H-gridpunten gedefinieerd.

Het voorgaande impliceert, dat modelinvoer voor SOBEK-River niet zondermeer aan SOBEK-Rural kan worden aangeboden, maar eerst moet worden geconverteerd van een River-schematisatie naar een Rural-schematisatie.



Bijlage B Geïntegreerd Transportmodel (GTM)

De kwaliteit van het Nederlandse grondwater verslechtert gestaag. De waterleidingbedrijven zien zich bij de grondwaterwinning voor drinkwater in toenemende mate geconfronteerd met kwaliteitsproblemen vanwege de hardheid van het water en de aanwezigheid van onder andere nitraat, bestrijdingsmiddelen, trichlooretheen of nikkel. Dat maakt een model dat de kwaliteit van grondwater bij drinkwaterwinningen modelleert tot een nuttig instrument. In opdracht van acht waterleidingsbedrijven heeft NITG-TNO samen met Kiwa Onderzoek en Advies een geïntegreerd transportmodel (GTM) ontwikkeld, dat hiervoor geschikt is.

Dit model onderscheidt zich in verschillende opzichten van bestaande modellen. De verschillende transportmodellen voor in- en uitvoerverwerking zijn bijvoorbeeld onderling gekoppeld. Ze zijn via de grafische gebruikersinterface MODGIS ingebed in een database- en GIS-structuur. Het resultaat is een gebruikersvriendelijk transportmodel, dat een koppeling realiseert tussen de macrochemie van de ondergrond en het gedrag van microverontreiniging aldaar. MODGIS maakt het bijvoorbeeld mogelijk om ruimtelijke gegevens via grids in te voeren en de uitvoerresultaten via gridkaarten te visualiseren. Naast de modellering van de grondwaterkwaliteit bij drinkwaterwinningen kan het model onder andere zijn nut bewijzen bij de ontwikkeling van in-situ saneringstechnieken die zijn gebaseerd op bio-geochemische processen.

Achter het model schuilt de filosofie van de hydro-geochemische milieu's. De definitie daarvan is: een geografische eenheid in de ondergrond met een unieke samenstelling van het sediment en zijn poriewater. Overgangen in pH en redoxtoestand worden gezien als overgangen in milieu, omdat bij dergelijke cesuren wezenlijke veranderingen in de samenstelling van zowel het poriewater als het sediment aan de orde zijn. Dit concept wordt vooral gebruikt om de procesparameters voor transport van microverontreinigingen te bepalen of in te schatten.

De koppeling tussen het gedrag van individuele microverontreinigingen en de macrochemie van de ondergrond is een onontbeerlijke factor. Sommige onderzoeksvragen kunnen om één enkel bestrijdingsmiddel gaan en niet om de gehele chemische samenstelling van het grondwater. Dat neemt niet weg dat de macrochemie van de ondergrond invloed uitoefent op dat middel. Sommige bestrijdingsmiddelen zijn onder zuurstofhoudende omstandigheden biologisch afbreekbaar en bij zuurstofloze condities niet. Andere zijn juist onder zuurstofloze omstandigheden beter afbreekbaar.

Het model van TNO en Kiwa gebruikt internationaal geaccepteerde en gevalideerde modelcodes. Het uitgangspunt voor het berekenen van advectief/ dispersief transport is de algemeen beschikbare eindige-differentie modelcode MT3D96. Deze bouwt voort op de veel gebruikte modelcode MODFLOW.

De wijze waarop het model de transportberekeningen uitvoert, hangt af van het type probleem dat iemand wil modelleren. Wie alleen in nitraat is geïnteresseerd, kan kiezen voor een meervoudige versie van MT3D96 (multi-MT3D96), gekoppeld aan de module BIODEG. Die beschouwt onder andere denitrificatie. Deze combinatie maakt het mogelijk alleen het gedrag van redoxgevoelige *reactanten* te modelleren, zonder dat *reactieproducten* het gewenste beeld beïnvloeden.



Voor een modellering van de volledige grondwatersamenstelling is de koppeling van multi-MT3D96 met PHREEQC en eventueel BODEG bruikbaar. PHREEQC is een hydrogeochemisch rekenmodel van de Amerikaanse geologische dienst. Het maakt simulatie van zeer veel verschillende typen van geochemische processen in waterige systemen mogelijk. De behoefte aan een dergelijke simulatie bestaat bijvoorbeeld wanneer we het effect van denitrificatie op de hardheid van het onttrokken grondwater willen kennen.

Voor het modelleren van het gedrag van microverontreinigingen hebben de onderzoekers twee modules ontwikkeld die de chemische modelparameters opstellen. Ze heten FATE en ISOTHERM. FATE richt zich op sorptie en afbraak van organische microverontreinigingen en ISOTHERM op niet-lineaire sorptie van de sporenelementen Zn, Ni, Cd, Cu en As. Er zijn algemeen geldende functies afgeleid, waarmee de sorptie aan de bodem wordt bepaald. Dit gebeurt op basis van de macro-grondwatersamenstelling en grondgegevens als lutumgehalte, organisch koolstofgehalte en de hoeveelheid ijzeroxide. Daarnaast is een grondwater-redoxclassificatie ontworpen, die de afbraakconstante van een organische microverontreiniging afhankelijk stelt van de redoxstatus van de ondergrond. De twee modules bieden een eerste inschatting van de reactiviteit van de bodem. Ze zijn vooral toepasbaar voor een modellering op regionaal niveau. Voor dergelijke gebieden zijn vrijwel nooit gedetailleerde gegevens beschikbaar over de geochemische eigenschappen van de ondergrond. Het gebruik van verfijnde modellen met een groot aantal procesparameters en variabelen heeft in dat geval geen zin.

Het geïntegreerd transportmodel heeft inmiddels de nodige tests achter de rug. Op twee verschillende locaties zijn modelleringen gemaakt: de freatische grondwaterwinning 't Klooster van Waterbedrijf Gelderland en de toekomstige diepinfiltratiewinning Langerak van de WZHO. Niet alleen de opdrachtgevende waterleidingbedrijven zullen in de praktijk met het model aan de slag gaan, maar ook TNO zelf. Er is voorzien in een cursus om de toekomstige gebruikers van het geïntegreerd transportmodel op te leiden.