

waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium

gebruikershandleiding

SAWES-nota 91.02



INHOUDSOPGAVE

1. INTRODUCTIE	3
1.1 <u>Systeemnaam</u>	3
1.2 <u>Doelstelling</u>	3
1.3 <u>Functiebeschrijving</u>	3
1.4 <u>Opzet van de handleiding</u>	3
1.5 <u>Probleemrapportage</u>	4
2. INSTALLATIE	5
2.1 <u>Vereiste hardware</u>	5
2.2 <u>Directory structuur en bestanden</u>	5
2.3 <u>Overige software</u>	5
2.4 <u>Gegevensbestanden</u>	6
3. GLOBALE SYSTEEMBESCHRIJVING	7
3.1 <u>Schematische weergave modelsysteem</u>	7
3.2 <u>Bediening van het modelsysteem</u>	8
4. VOORBEWERKINGSPROGRAMMATUUR	9
4.1 <u>Algemeen</u>	9
4.2 <u>Functie van de deelsystemen</u>	9
4.3 <u>Bediening voorbewerkingsprogramma's</u>	10
4.4 <u>Beschrijving van de invoerfiles</u>	12
5. WATERKWALITEITSMODEL DELWAQ-CHARON-DYNAMO	19
5.1 <u>Algemeen</u>	19
5.2 <u>Bediening</u>	19
5.3 <u>Beschrijving van de invoerbestanden</u>	22
6. NAVERWERKINGSPROGRAMMATUUR	24
6.1 <u>Algemeen</u>	24
6.2 <u>Beschrijving van de deelsystemen</u>	24
6.3 <u>Bediening van de naverwerkingsprogrammatuur</u>	26
6.4 <u>Beschrijving van invoerbestanden</u>	28
7. ARCHIVERING	29
7.1 <u>Bediening</u>	29

8. THEORETISCHE ACHTERGROND	30
9. REFERENTIES	31
BIJLAGE A Voorbeelden van invoerbestanden	32
BIJLAGE B: Invoer- en uitvoerbestanden per programma	33

1. INTRODUCTIE

1.1 Systeemnaam

Deze gebruikershandleiding behoort bij het SAWES waterkwaliteitsmodel, bestaande uit het basismodel voor stoftransport DELWAQ, modules van het chemisch evenwichtsmodel CHARON, de module DYNAMO voor phytoplankton processen en verschillende voor- en nabewerkingsprogramma's.

1.2 Doelstelling

Het SAWES waterkwaliteitsmodel is bedoeld om de invloed van verschillende beheersscenario's op de oppervlaktewater- en waterbodemkwaliteit in het het Schelde-estuarium na te gaan.

1.3 Functiebeschrijving

Het SAWES-model berekent de waterkwaliteit in termen van concentraties van de gemodelleerde stoffen, te weten zuurstof, BOD, organisch en anorganisch stikstof, phytoplankton en zware metalen. De gehalten zware metalen aan het bodemmateriaal bepalen de bodemkwaliteit.

Daarbij neemt het model in beschouwing:

- de inbreng van stoffen via rivieren, kanalen, depositie, polderlozingen, communale lozingen en industriële lozingen;
- het transport van opgeloste stoffen in de waterfase, bepaald door de waterbeweging;
- het transport van particulaire stoffen in de waterfase, bepaald door de slibtransporten;
- de bodem-wateruitwisseling;
- diverse chemische en biologische processen in de waterkolom.

1.4 Opzet van de handleiding

In hoofdstuk 2 van deze handleiding wordt de installatie van het model beschreven. Vervolgens komt in hoofdstuk 3 de algemene opbouw van het modelsysteem aan de orde. De hoofdstukken 4 tot en met 7 behandelen de

hoofdonderdelen van het model, te weten de voorberekingsprogrammatuur, de simulatieprogrammatuur, de naverwerkingsprogrammatuur en de archiveringsfaciliteiten. Hoofdstuk 8 tenslotte verwijst naar de inhoudelijke rapportage van het SAWES project.

1.5 Probleemrapportage

Technische problemen met het modelsysteem kunt U melden bij:

ir J.A.G. van Gils

Voor inhoudelijke vragen kunt U terecht bij:

drs M.R.L. Ouboter

drs N.M. de Rooij

Waterloopkundig Laboratorium

Sector Waterbeheer en Milieu

Postbus 177

2600 MH Delft

tel. 015-569353

2. INSTALLATIE

2.1 Vereiste hardware

Het model draait op een Personal Computer met MS-DOS besturingssysteem, tenminste 12 mB opslagruimte en een IBM-EGA grafische kaart en een kleurenmonitor. Een mathematische coprocessor is gewenst om excessieve rekentijden te voorkomen.

N.B.

Indien slechts een grafische kaart met zwart-wit monitor aanwezig is functioneert het gehele modelsysteem, uitgezonderd de naverwerkingsprogrammatuur die PC-films verzorgt.

De benodigde hoeveelheid vrij intern geheugen is 440 kB.

2.2 Directory structuur en bestanden

Het gehele modelsysteem dient op een speciaal daarvoor gecreëerde sub-directory te worden geïnstalleerd. De meegeleverde installatieprocedure maakt op die plaats een aantal aparte subdirectories aan om de verschillende onderdelen van het modelsysteem in op te slaan (zie bijlage C).

De installatieprocedure is als volgt:

- 1) Plaats de diskette in het diskettestation;
- 2) Type het commando `INSTALL <drive\directory>`, waarbij `<drive\directory>` de plaats is waar U het modelsysteem wilt installeren.

2.3 Overige software

Behalve de onder 2.2 genoemde bestanden dient de PC uitgerust te zijn met:

- Een editor (een programma om bestanden te creëren c.q. te wijzigen), men kan de naam van de gewenste editor invullen in het bestand `SAWES_E.BAT` op de directory `MODEL`.
- Een programma om bestanden in te zien, men kan de naam van het te gebruiken programma invullen in het bestand `SAWES_L.BAT` op de directory

MODEL.

- DELWAQ versie 3.04 of later, toegankelijk te maken via de bestanden SAWES2.BAT (executable DELWAQ1), SAWESOBJ ('object files') en SAWESLIB ('libraries').
- CHARON versie 5.02 of later, toegankelijk te maken via het bestand SAWESLIB ('libraries').
- De Microsoft Fortran Compiler versie 4.10 of later.

2.4 Gegevensbestanden

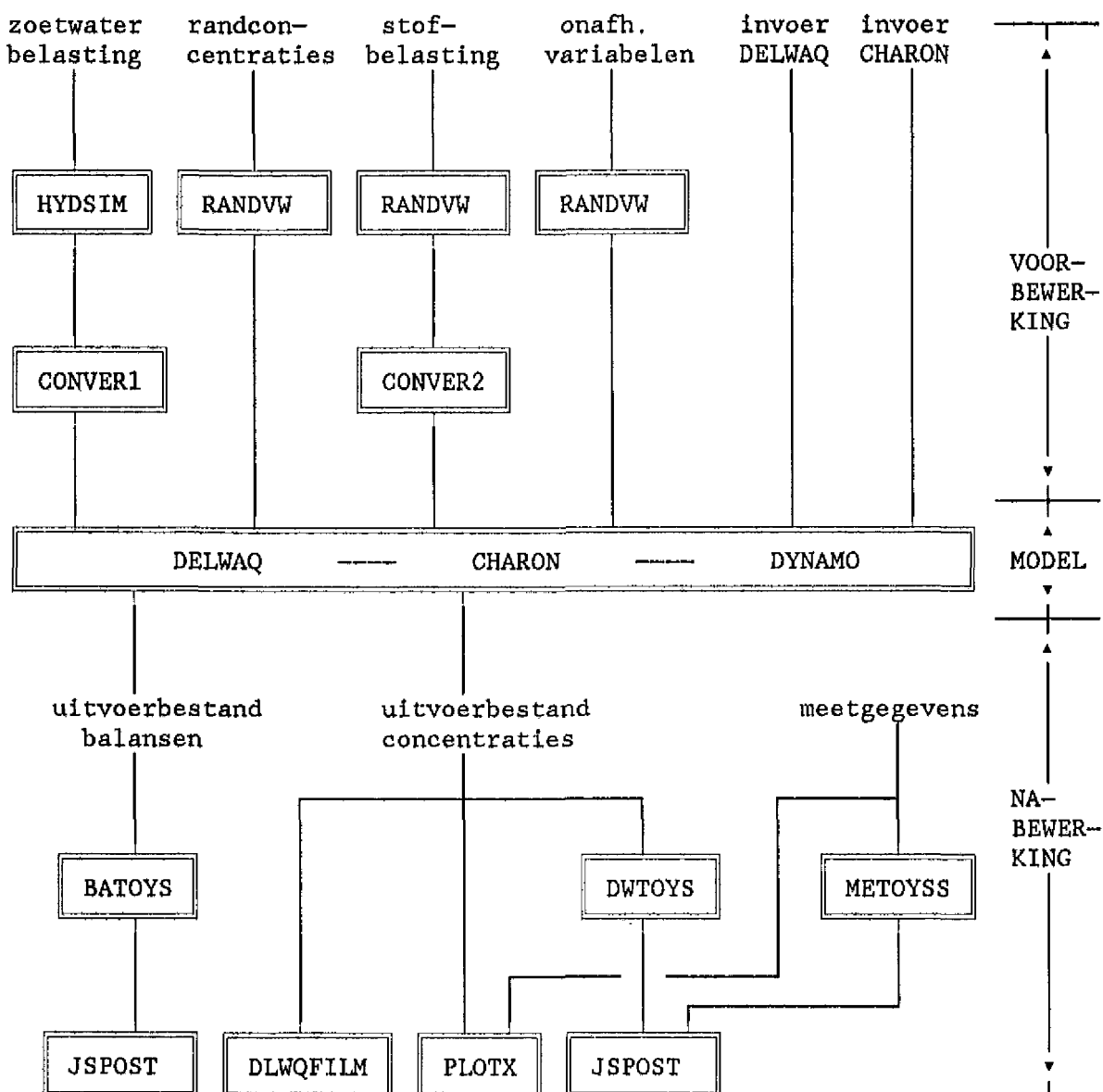
Het modelsysteem betreft op een aantal plaatsen informatie uit de SAWES-database zoals die is aangemaakt door de Dienst Getijdewateren in Middelburg. Deze database bestaat uit een grote verzameling zogenaamde .MAT-bestanden, die zijn ondergebracht in een subdirectory-structuur. Elk van deze bestanden bevat een tijdreeks van een bepaalde variabele (bijvoorbeeld debiet, chloridegehalte, temperatuur) op een bepaalde locatie (monsterpunt, polderwaterlozing, industriële lozing, etc.). De precieze opbouw van de SAWES-database is beschreven in [2].

De SAWES-database dient toegankelijk te zijn vanaf de PC waar het modelsysteem is geïnstalleerd, hetzij direct op de harde schijf, hetzij op een externe schijfeenheid, hetzij via een netwerkverbinding met een andere computer.

3. GLOBALE SYSTEEMBESCHRIJVING

3.1 Schematische weergave modelsysteem

Figuur 1 laat zien welke programma's deel uitmaken van het modelsysteem, en laat zien welke informatie zij uitwisselen.



Bijlage B bevat een complete lijst van alle bij het modelsysteem behorende invoer-, uitvoer- en tussenbestanden.

3.2 Bediening van het modelsysteem

Het modelsysteem wordt bediend met behulp van een aantal keuzemenu's die de gebruiker de mogelijkheid geven verschillende taken uit te laten voeren. Deze taken zijn verdeeld in vier groepen (zie ook het schema in par. 3.1):

- voorbereking;
- simulatie;
- nabewerking;
- archivering.

Bij de voorbereking, de simulatie en de nabewerking maakt het modelsysteem steeds gebruik van een groep invoer- en uitvoerbestanden die behoort bij de zogenaamde 'huidige run'. Via de archivering kan de gebruiker de bestanden van de huidige run opslaan, de huidige run vervangen door een eerder opgeslagen run of een eerder opgeslagen run vernietigen.

Het hoofdmenu wordt gestart vanaf de subdirectory MODEL door het commando SAWESO. Het hoofdmenu biedt de keus tussen vier secundaire menu's:

DELWAQ - CHARON - DYNAMO water- en bodemkwaliteitsmodel	
1.	Vorbewerkingsprogramma's
2.	DELWAQ - CHARON - DYNAMO
3.	Nabewerkingsprogramma's
4.	Archivering
5.	Naar MS-DOS

Voor de uitvoering van een simulatie dient de gebruiker de opties 'Vorbewerking', 'DELWAQ-CHARON-DYNAMO' en 'Nabewerking' te doorlopen. Voorafgaand hieraan moet eerst via de optie 'Archivering' een bestaande set invoerbestanden worden opgehaald. Na afloop kan via deze de invoer en/of de uitvoer worden opgeslagen.

In de nu volgende hoofdstukken komen de hoofdonderdelen van het modelsysteem in detail aan bod.

4. VOORBEWERKINGSPROGRAMMATUUR

4.1 Algemeen

In de voorberekingsfase worden gegevens verzameld die als invoer dienen voor het waterkaliteitsmodel. De voorberekingsfase bestaat uit vier deeltaken:

- verzamelen van de debietgegevens (programma HYDSIM);
- verzamelen van de (zee-)randvoorwaarden (programma RANDVW);
- verzamelen van de lozingsgegevens (programma RANDVW);
- verzamelen van de onafhankelijke sturende variabelen, de zogenaamde 'segmentsfuncties' (programma RANDVW).

Elk van deze taken wordt uitgevoerd met behulp van door de gebruiker aan te maken of te modificeren invoerbestanden.

4.2 Functie van de deelsystemen

4.2.1 HYDSIM (+CONVER1).

Het programma HYDSIM construeert het debietenbestand voor DELWAQ [1]. De gebruiker specificeert hiertoe de wijze waarop de rekenelementen gerangschikt zijn en legt per element de instromende en uitstromende debieten vast. Het programma berekent dan de debieten in de modelschematisatie, gebaseerd op de massabalans voor water voor elk rekenelement.

Het programma ontleent de tijdsfuncties voor in- en uitstromende debieten aan de SAWES database [2].

Na HYDSIM roept het modelsysteem automatisch het conversieprogramma CONVER1 aan.

4.2.2 RANDVW (+CONVER2).

Het programma RANDVW maakt een bestand met tijdsafhankelijke informatie aan voor DELWAQ, op basis van informatie in de SAWES database [2]. Het programma wordt gebruikt voor drie soorten informatie:

- 1) de randvoorwaarden voor DELWAQ (de concentraties op de bovenstroomse en benedenstroomse modelrand);
- 2) de stoflozingen voor DELWAQ;

3) de onafhankelijke variabelen (temperatuur en zwevende stofgehalte).

De gebruiker specificeert hiertoe per variabele een constante waarde of een tijdreeks. Eventueel kunnen meerdere tijdreeksen en constante waarden bij elkaar opgeteld of van elkaar afgetrokken worden. Niet gespecificeerde variabelen krijgen de waarde nul.

Deze informatie wordt door RANDVW voor een te kiezen simulatieperiode verwerkt tot een gegevensfile in DELWAQ notatie [1].

Na de aanroep van RANDVW t.b.v. de stoflozingen roept het modelsysteem automatisch het programma CONVER2 aan dat het databestand met de lozingsgegevens comprimeert zodat de verwerking door DELWAQ minder tijd vergt.

4.3 Bediening voorberekingsprogramma's

Het voorberekingsmenu ziet er als volgt uit:

DELWAQ - CHARON - DYNAMO voorbewerkingsprogramma's	
1.	Invoer HYDSIM
2.	Draai HYDSIM
3.	Invoer randvoorwaarden
4.	Maak randvoorwaarden aan
5.	Invoer lozingen
6.	Maak lozingen aan
7.	Invoer temp./zwev.stof
8.	Maak temp./zwev.stof aan
9.	Naar hoofdmenu

De acties die per optie worden uitgevoerd zijn:

1. Edit de invoerbestanden voor het aanmaken van debiet-informatie (BASIS.INP en HYDSIM.INP).

U hoeft deze optie alleen te kiezen indien U iets wilt wijzigen in de debiet-informatie (bijvoorbeeld een andere simulatieperiode).

2. Draai het programma HYDSIM om een debietenbestand aan te maken en bekijk vervolgens het bestand HYDSIM.MES (relevante uitvoerfiles:

POINTER.DAT en FLOW.DAT). Indien daar aanleiding toe is, ga dan terug naar optie 1 en wijzig de invoer.

Vervolgens wordt automatisch het programma CONVER1 gedraaid (omzetting van POINTER.DAT en FLOW.DAT naar POINTER.DA2 en FLOW.DA2).

3. Edit de invoerbestanden voor het aanmaken van de (zee-)randvoorwaarden (BASIS.INP en RANDVW1.INP).

U hoeft deze optie alleen te kiezen indien U iets wilt wijzigen in de randvoorwaarden (bijvoorbeeld een andere simulatieperiode of de reductie van stofconcentraties op de zeerand).

4. Draai het programma RANDVW om randvoorwaarden aan te maken en bekijk vervolgens het bestand RANDVW.MES (relevant uitvoerbestand: RANDVW.DAT). Indien daar aanleiding toe is, ga dan terug naar optie 3 en wijzig de invoer.

5. Edit de invoerbestanden voor het aanmaken van de lozingsgegevens (BASIS2.INP en LOZING.INP).

U hoeft deze optie alleen te kiezen indien U iets wilt wijzigen in de lozingen (bijvoorbeeld een andere simulatieperiode of de sanering van lozingen).

6. Draai het programma RANDVW om lozingen aan te maken en bekijk vervolgens het bestand RANDVW.MES (relevant uitvoerbestand: LOZING.DAT). Indien daar aanleiding toe is, ga dan terug naar optie 5 en wijzig de invoer.

Vervolgens wordt automatisch het programma CONVER2 gedraaid (omzetting van LOZING.DAT naar LOZING.DA2).

7. Edit de invoerbestanden voor het aanmaken van de segmentsfuncties (BASIS3.INP en SEGFUN.INP).

U hoeft deze optie alleen te kiezen indien U iets wilt wijzigen in de segmentsfuncties (bijvoorbeeld een andere simulatieperiode of de sanering van lozingen).

8. Draai het programma RANDVW om segmentsfuncties aan te maken en bekijk vervolgens het bestand RANDVW.MES (relevant uitvoerbestand: SEGFUN.DAT). Indien daar aanleiding toe is, ga dan terug naar optie 7 en wijzig de invoer.

Vervolgens wordt de uitvoerfile SEGFUN.DAT in een editssessie gebracht. De gebruiker dient dan de eerste regel uit dit bestand te verwijderen. (Dit is een noodzakelijke actie vanwege de opzet van de invoerfile van DELWAQ).

4.4 Beschrijving van de invoerfiles

4.4.1 Stuurinvoer voorbewerkingsprogramma's

Filenamen: BASIS.INP, BASIS2.INP, BASIS3.INP.

De positie van de getallen is niet van belang, tenzij anders vermeld.

regel 1:	datum begin simulatie (jjmmdd)
regel 2:	tijd begin simulatie (hhmm)
regel 3:	schakelaar voor DELWAQ tijdseenheid: 0 = tijd in DELWAQ in 'system clock units' 1 = tijd in DELWAQ in seconden, weergegeven in de 'ddhhmmss' notatie (noot 3)
regel 4:	'system clock unit' in seconden (noot 3)
regel 5:	'auxiliary time unit' in 'system clock units' (noot 3)
regel 6:	begin van de simulatie (DELWAQ notatie)
regel 7:	einde van de simulatie (DELWAQ notatie)
regel 8:	tijdsinterval in de invoerbestanden voor DELWAQ (DELWAQ notatie)
regel 9:	format debieten (tussen aanhalingstekens)
regel 10:	format doorsneden (tussen aanhalingstekens) (noot 4)
regel 11:	format volumens (tussen aanhalingstekens)
regel 12:	format diepten (tussen aanhalingstekens)
regel 13:	format snelheden (tussen aanhalingstekens)
regel 14:	N1 (noot 1)
regel 15:	N2 (noot 1)
regel 16:	format voor variabelen (noot 2)

Noten:

1. De getallen N1 en N2 behoeven nog enige toelichting. Ze zijn van belang wanneer het programma RANDVW wordt gebruikt, dat wil zeggen bij het aanmaken van randvoorwaarden, stoflozingen en segmentsfuncties (temperatuur/zwevende stof).

De betekenis van deze getallen is:

	N1	N2
randvoorwaarden	aantal randen	aantal actieve stoffen
stoflozingen	aantal lozingen	totaal aantal stoffen + 1
segmentsfuncties	aantal segmentsfuncties	aantal elementen

2. Het begrip 'format' is afkomstig uit de programmeertaal FORTRAN. Het is een gecodeerde instructie voor de vorm waarin getallen moeten worden weggeschreven. Voor reële getallen luidt deze instructie:

'(aFb.c)'

a = aantal getallen per regel
b = aantal posities per getal
c = aantal posities achter de komma

3. Een aantal begrippen is afkomstig van het model DELWAQ, zie hiervoor de documentatie van dit model [1].
4. Regel 10 t/m 13 zijn voor de huidige modelimplementatie niet relevant, maar mogen niet ontbreken.

4.4.2 Invoerbestand HYDSIM

Filenaam: HYDSIM.INP, de positie van de invoergegevens is niet van belang.

Elke regel moet 5 invoergegevens bevatten met informatie over een verbinding tussen twee rekenelementen in DELWAQ:

IFROM, ITO, FILNAM, ICOLUM, SCALE

IFROM : 'van-element', een geheel getal;
ITO : 'naar-element', een geheel getal;
FILNAM : een bestandsnaam uit de SAWES database
 (tussen aanhalingstekens);
ICOLUM : een kolomnummer betrekking hebbend op het opgegeven

bestand;

SCALE : een schaafactor, een reëel getal.

IFROM en ITO definieren de twee verbonden rekenelementen. Een modelrand wordt aangegeven met een negatief getal:

IFROM	ITO	verklaring
>0	>0	interne verbinding tussen twee rekenelementen
<0	>0	instroming, verbinding modelrand - rekenelement
>0	<0	uitstroming, verbinding rekenelement - modelrand

De absolute waarde van een negatief getal, een modelrand, stelt de gebruiker in staat meerdere modelranden met een verschillende waterkwaliteit te onderscheiden.

FILNAM, ICOLUM en SCALE definiëren het debiet tussen de verbonden elementen. Er zijn diverse mogelijkheden:

FILNAM	ICOLUM	SCALE	verklaring
Geen naam (' ')	0	>99999.	Optie a).
Geen naam (' ')	0	<99999.	Optie b).
Bestandsnaam	>0	<99999.	Optie c).

- a) Het debiet is onbekend en moet worden afgeleid uit de massabalans per rekenelement.
- b) Het debiet is constant en gelijk aan SCALE.
- c) Het debiet is tijdsafhankelijk en wordt gelezen uit de ICOLUM-e kolom van het bestand FILNAM en geschaald met SCALE.

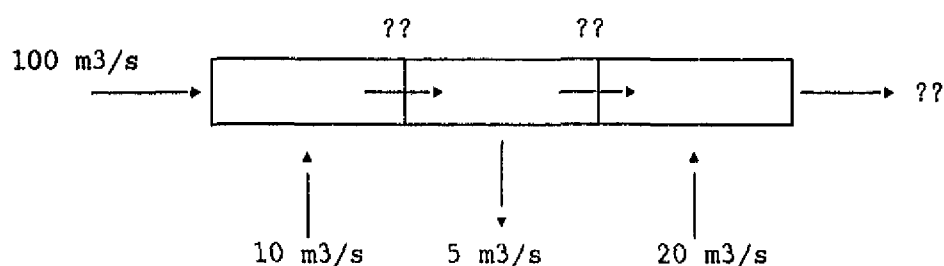
N.B. ICOLUM wordt geteld vanaf de eerste kolom achter de kolom die de tijd aangeeft.

De keuze van voorgeschreven en onbekende debieten moet zodanig zijn dat het programma de onbekende debieten kan afleiden uit de massabalans voor de rekenelementen.

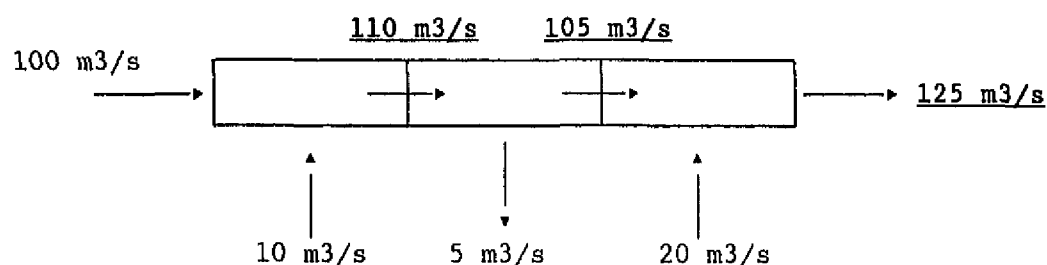
Het programma stelt voor ieder rekenelement een massabalans op. Als er NOSEG elementen zijn, zijn er dus ook NOSEG massabalansen. Elke massabalans kan een aantal onbekende debieten bevatten. Het programma kan deze slechts dan uitrekenen, wanneer het aantal onbekende debieten gelijk is aan het aantal massabalansvergelijkingen, te weten NOSEG.

In de praktijk komt bovenomschreven voorwaarde erop neer dat de gebruiker alle INSTROMENDE debieten en eventuele ONTTREKKINGEN op één na moet voorschrijven. Het programma berekent dan de debieten tussen de reken-elementen en het resterende instromende of uitstromende debiet.

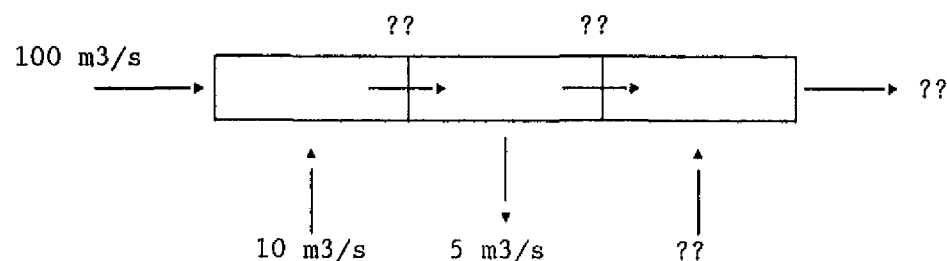
Voorbeeld



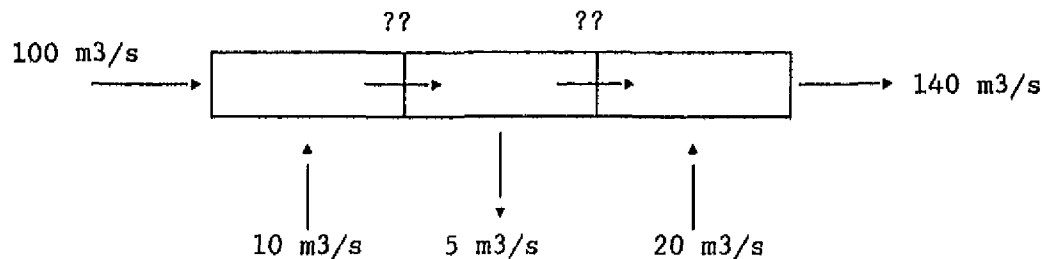
Bovenstaand voorbeeld is oplosbaar voor HYDSIM. Er zijn drie elementen, dus drie massabalansen en drie onbekende debieten. Met de voorwaarde dat de waterbalans per element moet kloppen levert HYDSIM de volgende uitkomst:



Niet oplosbaar zijn:



Bovenstaande schets heeft 4 onbekende debieten, het systeem is onderbepaald en HYDSIM vindt geen oplossing.



In dit geval zijn er slechts 2 onbekende debieten, het systeem is overbepaald en HYDSIM vindt geen oplossing.

4.4.3 Invoerbestand RANDVW

Filenaam: RANDVW1.INP, LOZING.INP, SEGFUN.INP.

De positie van de invoergegevens is niet van belang.

Elke regel bevat 5 invoergegevens en geeft informatie over een mogelijk tijdsafhankelijke grootte (randvoorwaarde, stoflozing of segmentsfunctie):

ILOC, IVAR, FILNAM, ICOLUM, SCALE

ILOC	: RANDVW1.INP: nummer van de rand (absolute waarde)
	LOZING.INP : nummer van de lozing
	SEGFUN.INP : nummer van de segmentsfunctie
IVAR	: RANDVW1.INP: nummer van de stof
	LOZING.INP : IVAR > 1: IVAR-1 = nummer van de stof
	IVAR = 1: lozingsdebiet
	SEGFUN.INP : elementnummer
FILNAM	: een bestandsnaam uit de SAWES-database
	(tussen aanhalingstekens),
ICOLUM	: een kolomnummer, betrekking hebbend op het opgegeven
	bestand,
SCALE	: een schaalfactor, een reeel getal.

FILNAM, ICOLUM en SCALE definiëren de waarde van een tijdsafhankelijke variabele (randconcentratie, lozingsdebiet, concentratie in geloosd water of de waarde van een segmentsfunctie).

Er zijn verschillende mogelijkheden:

FILNAM	ICOLUM	SCALE	verklaring
Geen naam (' ')	0	getal	Optie a).
Bestandsnaam	>0	getal	Optie b).

a) de variabele heeft een constante waarde = SCALE.

b) de variabele heeft een tijdsafhankelijke waarde, die wordt gelezen uit de ICOLUM-e kolom in het bestand FILNAM en wordt geschaald met SCALE.

N.B. ICOLUM wordt geteld vanaf de eerste kolom achter de kolom die de tijd aangeeft.

Als er geen invoerregel is voor een bepaalde combinatie van ILOC en IVAR is de bijbehorende waarde gelijk aan 0.

Als er meer dan een invoerregel is voor een bepaalde combinatie van ILOC en IVAR dan worden de bijbehorende constanten en tijdfuncties opgeteld (of afgetrokken als de schaaufactor negatief is).

4.4.4 Invoer tijdfuncties uit SAWES database

Deze files bestaan uit:

- een willekeurig aantal commentaarregels (eerste karakter #);
- een controleregel waarop de codering van de ontbrekende waarden staat (eerste karakter \$);
- per kolom een regel met toelichting (eerste karakter >);
- een aantal dataregels (eerste karakter een spatie).

De dataregels moeten in correcte tijdvolgorde staan en bevatten de volgende kolommen:

- de datum (jjmmdd);
- de tijd (hhmm);
- de waarden van een aantal parameters (1 t/m N).

N.B. In het SAWES-modelsysteem tellen bij de nummering van de kolommen de datumkolom en de tijd kolom niet mee.

5. WATERKWALITEITSMODEL DELWAQ-CHARON-DYNAMO

5.1 Algemeen

Het model DELWAQ-CHARON-DYNAMO berekent de waterkwaliteit en de bodemkwaliteit op basis van de gebruikersinvoer voor DELWAQ, CHARON en DYNAMO en de bestanden die zijn aangemaakt door de hiervoor beschreven voorbewerkingsprogramma's.

De uitvoer bestaat uit boodschappenbestanden en uit bestanden die als invoer dienen voor de naverwerkingsprogrammatuur.

5.2 Bediening

Het menu voor het simulatiegedeelte ziet er als volgt uit:

DELWAQ - CHARON - DYNAMO rekenprogramma	
1.	Edit DELWAQ-invoerbestand
2.	Edit CHARON-invoerbestand
3.	Invoerprogramma
4.	Aanmaken rekenprogramma
5.	DELWAQ-CHARON-DYNAMO
6.	Edit sessie
7.	Bekijk CHARON-uitvoer
8.	Bekijk DELWAQ-uitvoer
9.	Naar hoofdmenu

De acties per optie zijn:

1. Edit het invoerbestand voor DELWAQ: DELWAQ.INP.
Dit is alleen noodzakelijk indien U iets in de simulatie wilt wijzigen (bijvoorbeeld het tijdsinterval voor modeluitvoer of de waarde van de modelparameters).
2. Edit het invoerbestand voor CHARON: CHARON.INP.
Dit is alleen noodzakelijk indien U iets in de systeemdefinitie van CHARON wilt wijzigen of indien U controleboodschappen door CHARON wilt laten afdrukken.
3. Draai DELWAQ1 om de invoer voor DELWAQ te lezen en te controleren en

bekijk vervolgens het bestand DELWAQ.LST.

Indien er foutboodschappen in DELWAQ.LST staan ga dan terug naar optie 1 van dit menu en wijzig de invoer. Indien de foutboodschappen samenhangen met debieten, randvoorwaarden, stoflozingen of segmentsfuncties ga dan terug naar de voorberekingsprogramma's.

4. Maak DELWAQ2.EXE aan.

De PC-versie van DELWAQ vergt normaalgesproken een tussenstap waarbij het rekenprogramma wordt aangemaakt, en wel om twee redenen (zie ook [1]):

- om de juiste dimensionering van arrays te realiseren, op grond van informatie uit het invoerbestand;
- om de gebruikerssubroutines te compileren en aan de standaard DELWAQ-routines toe te voegen.

Indien de gebruikerssubroutines niet zijn gewijzigd, kunt U normaalgesproken deze stap overslaan. Het programma controleert zelf of de dimensionering van de arrays voldoende groot is en geeft een boodschap in DELWAQ.MON als dat niet het geval is.

5. Draai DELWAQ2, het simulatieprogramma.

6. Bekijk CHARON.OUT.

Dit bestand bevat de boodschappen en eventuele foutmeldingen uit CHARON. Indien de inhoud van dit bestand er aanleiding toe geeft kunt U de invoer voor DELWAQ-CHARON-DYNAMO aanpassen en de simulatie herhalen.

7. Bekijk DELWAQ.MON.

Dit bestand bevat de boodschappen en eventuele foutmeldingen uit DELWAQ. Indien de inhoud van dit bestand er aanleiding toe geeft kunt U de invoer voor DELWAQ-CHARON-DYNAMO aanpassen en de simulatie herhalen.

Voor het maken van een doorstart, het beginnen van een nieuwe simulatie met de eindconcentraties van een oude, dient U de volgende stappen te doorlopen:

- a. Doe de eerste simulatie waarbij U de beginwaarden zelf specificceert. Bij die simulatie ontstaat een uitvoerbestand DELWAQ.RES.
- b. Herhaal de simulatie waarbij U in blok 8 van het invoerbestand DELWAQ.INP aangeeft een 'binary intermediate file' met startwaarden te willen gebruiken. Indien U hiervoor de naam 'DELWAQ.RES' opgeeft

realiseert U een doorstart met de eindwaarden van de laatst uitgevoerde simulatie (zie verder [1]).

Indien U wilt doorstarten vanuit een simulatie die U reeds eerder heeft opgeslagen via het archiveringsmenu, dient U voorafgaande aan de doorstartsimulatie de uitvoerbestanden van deze run terug te halen (zie 'Archivering').

5.3 Beschrijving van de invoerbestanden

5.3.1 Invoerbestanden DELWAQ

Filenaam: DELWAQ.INP

Zie gebruikershandleiding DELWAQ [1].

Filenaam: STOCHI.INP

Bevat informatie over invloed van processen op modelvariabelen:

regel(s)	variabelen	positie	toelichting
1	NOFLX	vrij	aantal processen
2 t/m 1 + NOFLX	FLXNAM	1-12	naam van proces
alle volgende	SYNAME, FLXNAM, FACTOR	1-12 13-24 25-34	naam van een stof naam van een proces verhouding waarin de stof aan het proces deelneemt

5.3.2 Invoerbestand CHARON

Filenaam: CHARON.INP

Deze file bevat de blokken ROWS, MATRIX en CJCOR zoals die voorkomen in de stand-alone versie van CHARON. Men raadplege de CHARON handleiding [3] voor een beschrijving van deze blokken. Tevens bevat dit bestand een regel om de programmaboodschappen te sturen:

MESCOD (pos.1-11)

MESCOD: code voor het afdrukken van CHARON-boodschappen

'ALLMESSAGES': alle boodschappen

'MESSAGES' : alleen de belangrijkste boodschappen
'NOMESSAGES' : geen boodschappen (default)

5.3.3 Invoer DYNAMO

Invoer wordt geregeld via de invoer van DELWAQ.

6. NAVERWERKINGSPROGRAMMATUUR

6.1 Algemeen

Het modelsysteem biedt de mogelijkheid de modeluitvoer op verschillende wijzen grafisch te bekijken. Waar relevant worden de gemeten waarden van de uitvoervariabelen in de figuren afgebeeld.

Verschillende vormen van uitvoer zijn:

- grafieken van een uitvoervariabele als functie van de plaats of de tijd;
- de weergave van opeenvolgende langsprofielen in een grafiek ('lijnenfilm');
- de weergave van opeenvolgende langsprofielen door middel van kleuren in een geografische weergaven van het modelgebied ('PC-film');
- de weergave van stofbalansen: de bijdragen van transport, lozingen en processen aan de water- en bodemkwaliteit als functie van plaats en tijd.

6.2 Beschrijving van de deelsystemen

6.2.1 Uitvoer in de vorm van grafieken (METOYSS, DWTOYS en JSPOST).

Het programma DWTOYS zorgt voor de conversie van het resultaatbestand van DELWAQ naar een voor presentatie met JSPOST bruikbare vorm. Parallel daaraan converteert METOYSS databestanden met meetgegevens uit de SAWES-database. Het programma JSPOST presenteert de modelresultaten in de vorm van tijd-functies en langsprofielen. De meetgegevens worden afgebeeld als sterretjes.

6.2.2 Lijnenfilms (programma PLOTX)

Het programma PLOTX beeldt de modelresultaten af op het scherm in de vorm van een bewegende lijn. Langs de x-as is de afstand tot de bovenstroomse model-rand uitgezet, langs de y-as de waarde van een modelvariabele naar keuze. Door voor opeenvolgende tijdstippen deze figuur te tekenen ontstaat een bewegend beeld, dat op elk gewenst moment kan worden stopgezet.

Het programma biedt de mogelijkheid twee modelsimulaties met elkaar te vergelijken en gemeten waarden als sterretjes af te beelden.

De meetgegevens worden uit de SAWES-database gehaald. Omdat dit een nogal tijdrovende zaak is maakt het programma bij de eerste aanroep automatisch

hulpbestanden aan waarin (per stof) de meetgegevens voor alle locaties worden opgeslagen (bestand Pxxxxxx.MET). Bij elke volgende aanroep worden de meetgegevens zonder tussenkomst van de gebruiker uit deze tussenbestanden gelezen, waardoor een grote tijdwinst ontstaat.

6.2.3 PC-films (programma DLWQFILM)

Het programma DLWQFILM beeldt de modelresultaten af op het scherm in de vorm van kleuren in een geografische weergave van het gemodelleerde gebied (PC-film). De opmaak van het beeld kan vrijwel volledig worden gecontroleerd via de invoer van het programma (bestand DLWQFILM.INP).

Het programma toont een geografische weergave van het Schelde-estuarium, waarin door middel van kleuren de waarde van een modelvariabele naar keuze valt af te lezen. In beeld is een kleurenschaal zichtbaar waaruit men af kan leiden met welke getalswaarden een bepaalde kleur overeenkomt. Door voor opeenvolgende tijdstippen dit plaatje af te beelden ontstaat een bewegend beeld, dat op elk gewenst moment kan worden stopgezet.

Deze faciliteit werkt alleen indien een kleurenbeeldscherm beschikbaar is. Het programma zelf is niet in staat een hardcopy te produceren.

6.2.4 Balansenuitvoer (programma's BATOYS en JSPOST).

Het programma BATOYS voert een tussenbewerking uit op het bestand met massabalansen, behorend bij de simulatie.

De balansen behorend bij een simulatie met het waterkwaliteitsmodel kunnen worden afgebeeld door het programma JSPOST. De mogelijk bestaat om de balansen als een tijdfunctie op een bepaalde plaats of een langsprofiel op een bepaalde tijd af te beelden. In de plaatjes zien we de bijdrage van transport, lozingen en diverse waterkwaliteitsprocessen aan de totaalbalans afgebeeld met een bepaalde kleur. De eenheid is vermeld boven het plaatje. Het programma presenteert onder de naam 'Element som' een balans voor de som van de rekenelementen.

N.B. Ten onrechte voegt het presentatieprogramma nog een 'Tot. systeem' toe.

Deze uitvoer kan foutief zijn en dient genegeerd te worden.

Verder produceert het programma naar keuze een afdruk op de printer of een bestand met getalswaarden behorend bij een grafiek.

Deze presentatie-faciliteit werkt alleen met een kleurenbeeldscherm.

6.3 Bediening van de naverwerkingsprogrammatuur

Het menu voor de naverwerkingsprogramma's ziet er als volgt uit:

DELWAQ - CHARON - DYNAMO naverwerkingsprogramma's	
1.	Presentatie tijdfuncties
2.	Presentatie lijnenfilms (+ WAKWAL-metingen)
3.	Presentatie lijnenfilms (+ SAWES-metingen)
4.	Presentatie kleurenfilm
5.	Definitie balansen
6.	Presentatie balansen
7.	Naar hoofdmenu

De acties per optie zijn:

1. Draai het programma JSPOST om de resultaten van de huidige run af te beelden als functie van de plaats en de tijd.
Indien nodig (na een nieuwe simulatie) wordt eerst het conversieprogramma DWTOYS gedraaid om modelresultaten te converteren.
Indien de simulatieperiode is aangepast wordt ook het programma METOYSS gedraaid om meetgegevens uit de SAWES-database op te halen.
2. Draai het programma PLOTX ('lijnenfilm') voor de huidige run met meetgegevens uit WAKWAL.
3. Draai het programma PLOTX ('lijnenfilm') voor de huidige run met meetgegevens van de SAWES vaartochten (alleen mogelijk voor de periode 1-1-1987 tot 1-3-1988).
4. Draai het programma DLWQFILM (PC-animatiefilm) voor de huidige run.
5. Edit BATOYS.INP.
Hier kan de gebruiker definiëren voor welke stoffen of groepen van stoffen een balans gewenst is.
Dit is alleen noodzakelijk indien men balansen wil toevoegen, verwijderen of aanpassen.
6. Draai het programma JSPOST om de stofbalansen af te beelden voor de huidige run.
Indien nodig (na een nieuwe simulatie) wordt eerst het conversieprogramma BATOYS gedraaid om de balansen te construeren.

Bediening JSPOST

De bediening van het programma is interactief. De juiste namen van de invoerfiles worden in het eerste invoerscherm ingevuld (deze worden gelezen uit JSPOST1.INI voor de grafieken respectievelijk JSPOST3.INI voor de balansen).

Buiten het menu om kan het presentatieprogramma worden gestart met het commando `..\JSPOSTN\JSPOSTN argument1 argument2`.

Het programma archiveert elke presentatie-sessie automatisch in een bestand DEFAULT.CMD. Een dergelijke .CMD-file kan indien haar naam als `argument1` wordt meegegeven opnieuw afgespeeld worden (de bestanden JSPOST1.INI en JSPOST3.INI zijn dergelijke .CMD-files). Indien `argument2` de letter P is, dan maakt het programma van elke afbeelding automatisch een afdruk.

Bediening PLOTX

De keuze van de simulatie(s) en het al of niet afbeelden van metingen vindt plaats op interactieve wijze of via de commando-regel bij het starten van het programma.

In het eerste geval vraagt het programma om:

- het aantal berekeningen (0, 1 of 2);
- een aantal bestandsnamen, afhankelijk van het antwoord op de vorige vraag;
- het J(a) of een N(ee) weergeven van metingen.

In het laatste geval worden deze antwoorden in de juiste volgorde op de commando-regel meegegeven bij het starten van het programma.

De keuze van de uitvoerparameter vindt plaats met behulp van een cijfer. Het cijfer '0' beëindigt het programma.

Buiten het menu om dient het programma te worden gestart met het commando `..\PROGRAMS\PLOTX`.

Betekenis van de toetsen tijdens de lijnenfilm:

- willekeurige toets: pauzeren resp. verdergaan;
- toets 'p': afdruk op de printer;
- toets 'q': indien de film stilstaat: stoppen.

Bediening DLWQFILM

De bediening van de film is interactief. De keuze van de uitvoerparameter vindt plaats met behulp van een cijfer. Het cijfer '0' beeindigt het programma.

De betekenis van de toetsen tijdens de film is als volgt:

- toets 's': pauzeren resp. verdergaan;
- toets 'q': 1x: pauzeren, 2x: stoppen.

6.4 Beschrijving van invoerbestanden

6.4.1 Invoer definitie balansen

Filenaam: BATOYS.INP

Bevat informatie over de samenstelling van balansen.

regel(s)	variabelen	positie	toelichting
1	NOBAL	vrij	aantal balansen
2 t/m 1 + NOBAL	BALNAM	1-12	naam van balans
alle volgende	SYNAME, BALNAM, FACTOR	1-12 13-24 25-34	naam van een stof naam van een balans verhouding waarin de stof aan de balans bijdraagt

7. ARCHIVERING

7.1 Bediening

Het menu voor de archivering ziet er als volgt uit:

DELWAQ - CHARON - DYNAMO archivering	
1.	Sla invoerbestanden op
2.	Haal invoerbestanden op
3.	Verwijder invoerbestanden
4.	Sla uitvoerbestanden op
5.	Haal uitvoerbestanden op
6.	Verwijder uitvoerbestanden
7.	Naar hoofdmenu

Archivering vindt plaats aan de hand van een identificatiecode, bestaande uit drie willekeurige cijfers of letters.

De acties per optie zijn:

1. Sla de invoerbestanden van de huidige run op.
2. Vervang de invoerbestanden van de huidige run door een set eerder opgeslagen invoerbestanden. U dient nu weer alle stappen van voorbewerking en simulatie te doorlopen om de nieuwe run te draaien.
3. Verwijder de invoerbestanden van een eerder opgeslagen run.
4. Sla de uitvoerbestanden van de huidige run op.
5. Vervang de uitvoerbestanden van de huidige run door een set eerder opgeslagen uitvoerbestanden. U kunt nu direct alle opties van het naverwerkingsmenu kiezen.
6. Verwijder de uitvoerbestanden van een eerder opgeslagen run.

Bijlage B laat zien welke bestanden worden gearchiveerd als invoer-respectievelijk uitvoerbestand.

8. THEORETISCHE ACHTERGROND

Voor de beschrijving van de theoretische achtergronden van het modelsysteem wordt verwezen naar het hoofdrapport over het modelinstrumentarium ten behoeve van het project SAWES [4].

9. REFERENTIES

- [1] DELWAQ Users Manual, DELFT HYDRAULICS, 1990.
- [2] De belasting van het Schelde-estuarium, Nota GWWS-90.086, Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, Middelburg 1991.
- [3] Manual CHARON, JSBACH, FUN, DELFT HYDRAULICS, 1990.
- [4] Waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, Waterloopkundig Laboratorium, rapport T257, SAWES-nota 91.01, maart 1991.

BIJLAGE A Voorbeelden van invoerbestanden

Listings toevoegen van calibratierun:

BASIS.INP

BASIS2.INP

BASIS3.INP

HYDSIM.INP

RANDVW1.INP

LOZING.INP

SEGFUN.INP

DELWAQ.INP

STOCHI.INP

CHARON.INP

BATOYS.INP

BIJLAGE B: Invoer- en uitvoerbestanden per programma

	H Y D S I M	C O N V E R 1 1	R A N D V W 1 1	R A N D V W 2 2	C O N V E R 2 3	D E W O Y S 1	D E W O Y S 1	M E S T 1	J E S T 1	P O T X 1	P O T X 2	D E W O Y S 1	B A T O Y S 2	J E S T 2	
Database	I		I	I	I			I		I	I				A
BASIS .INP	I	I	I												G
HYDSIM .INP	I														G
HYDSIM .MES	O														-
POINTER .DAT	O	I													-
FLOW .DAT	O	I													-
CONVER1 .MES		O													-
POINTER .DA2		O				I									-
FLOW .DA2		O				I									-
RANDVW1 .FIL			I												A
RANDVW1 .INP			I												G
RANDVW .MES			O	O	O										-
RANDVW .DAT			O			I									-
RANDVW2 .FIL				I											A
BASIS2 .INP				I	I										G
LOZING .INP				I											G
LOZING .DAT				O	I										-
LOZING .LST					I										A
CONVER2 .MES					O										-
LOZING .DA2					O	I									-
RANDVW3 .FIL						I									A
BASIS3 .INP						I									G
SEGFUN .INP						I									G
SEGFUN .DAT						O	I								-
DELWAQ .INI							I								A
DELWAQ .INP							I								G
CHARON .INP							I								G
STOCHI .INP							I						I		G
DELWAQ .MON							O								-
CHARON .OUT							O								-
DELWAQ .MAP							O						I		R
DELWAQ .RES							O								-
SAWES .MAP							O	I				I			R
SAWES .BAL							O						I		R
DWTOYS .INI								I							A
DWTOYS .LAN								I							A
SAWES .STU								O		I					-
SAWES .PST								O		I					-
STOFPP .LST									I						A
SEGMENT .LST									I						A

	H Y D S I M	C O N V R	R A N D V W	R A N D V R	C O N D V W	R A N D V W	D E L W A Q	D T O Y S	M E O S S	J S O S T	P L O T X	P L O T X	D L Q F I L	B A T O Y S	J S P O S T	
			1	1	2	2	3		S	1			1	2		2
													M			
METOYS .STU								O	I							-
METOYS .MET								O	I							-
NETOYS .OUT								O								-
JSPOST1 .INI									I							A
JSPOSTN .FIL									I					I		A
SAWESVRT .STU									I							A
SAWESVRT .PST									I							A
JSPOSTN .OUT									O							-
PLOTX .INP										I	I					A
BASISP .INP										I	I					A
PLOTX1 .MIN										I						A
PLOTX2 .MIN											I					A
PLOTX .OUL										O	O					-
DLWQFILM .STR												I				A
DLWQFILM .INP												I				A
C .BIT												I				A
V .BIT												I				A
SETTING .DAT												I				A
BATOYS .INI													I			A
BATOYS .FIL													I			A
BATOYS .INP													I			G
BATOYS .MES													O			-
BATOYS .STU													O	I		-
BATOYS .PST													O	I		-
JSPOST3 .INI														I		A

I = invoerbestand
O = uitvoerbestand

A = aan te maken door systeembeheerder
G = aan te maken door de gebruiker, worden gearchiveerd als invoerbestanden
R = worden gearchiveerd als uitvoerbestanden
- = overige bestanden