

Detailontwerp opname tempera- tuurmodel in WAQUA/TRIWAQ

Technisch Rapport

TR06-07 versie 1.0

Datum

3 november 2006

Auteur(s)

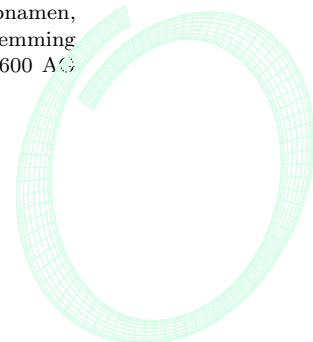
Edwin Vollebregt en Peter van den Bosch

In opdracht van

Rijkswaterstaat/RIKZ,
overeenkomst RKZ-1629, change c57653

Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand, of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enigerlei wijze hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën, opnamen, of op enige andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de opdrachtgever danwel VORtech Computing, Postbus 260, 2600 AG DELFT.

© VORtech Computing 2006.



Log-sheet

Versie	Auteur	Datum	Opmerkingen	Review
0.1	EV	30-08-2006	Eerste opzet van rapport	
0.2	EV	08-09-2006	Eerste invulling powerstations, formuleringen	
0.3	MW, EV	29-09-2006	Invulling afhandeling meteo-invoer	PvdB
0.4	MW, EV	05-10-2006	Verdere invulling invoerfile WAQPRE	JD
0.5	EV	05-10-2006	Toevoeging plan van aanpak en tijdschatting	PvdB
0.9	EV	06-10-2006	Toevoeging discussie WAQWND, afronding	
1.0	EV	03-11-2006	Aanpassingen n.a.v. bespreking ES	PvdB
Bestandslokatie: /v3/E05q_bo_simona/c57653-temp-model/report				

Inhoudsopgave

Log-sheet	2
1 Inleiding	5
2 Afhandeling van meteo-invoer	7
2.1 Functioneel ontwerp aansturing door de gebruiker	7
2.2 Ontwerp van de aanpassingen aan WAQWND	9
2.2.1 Inventarisatie van gegevens van KNMI en ECMWF	9
2.2.2 Keuzes m.b.t. coördinatentransformaties	10
2.2.3 Aansturing van WAQWND door de gebruiker	10
2.2.4 WAQWND output	12
2.2.5 Discussie m.b.t. WAQWND	13
2.3 Ontwerp van de aanpassingen aan WAQPRE	14
2.3.1 Specificatie van meteo-invoer in de siminp-file	14
2.3.2 Toevoegingen aan de WAQUA/TRIWAQ SDS-file	17
2.3.3 Specificatie van het temperatuurmodel in de siminp-file	18
2.3.4 Documentatie WAQPRE	20
2.3.5 Aanpassing van IPW	20
2.4 Testen	20
3 Koppeling van inname- en lozingspunten	21
3.1 Gewenste functionaliteit van “powerstations”	21
3.2 Voorgestelde uitbreiding van de gebruikersinvoer	22
3.3 Implementatie in WAQPRE	23
3.4 (Numerieke) afhandeling in WAQPRO	24
3.5 Parallellisatie-aspecten van powerstations	25
3.6 Beoogde testen voor de nieuwe functionaliteit	27

4	Formuleringen voor temperatuur	28
4.1	Opname van de testversie van Alkyon	28
4.2	Opname van de projectversie van NOMADS2	29
4.3	Impliciet maken van temperatuur-sinks in WAQUA	31
4.4	Ontwerp solvermodules	32
4.5	Aanpassingen technische documentatie	33
4.6	Beoogde testen temperatuurmodel	34
5	Plan van aanpak en tijdschatting	35
	Referenties	38

Hoofdstuk 1

Inleiding

In 2005 heeft Alkyon een project uitgevoerd voor koelwatermodellering voor het Noordzeekanaal. Daarbij is het Sweers temperatuurmodel dat in WAQUA is geïmplementeerd ook in een projectversie van TRIWAQ beschikbaar gemaakt. Deze projectversie van TRIWAQ zou verder moeten worden uitgebreid en moeten worden opgenomen in de moederversie van de programmatuur.

Dit werk wordt uitgevoerd onder het contract voor het beheer en onderhoud van de SIMONA programmatuur. De eerste fase is het schrijven van een ontwerp (het huidige rapport), en komt overeen met change c57653. Deze change wordt door VORtech en Alkyon samen uitgevoerd. Voor de daadwerkelijke implementatie zal te zijner tijd een aparte change worden aangemaakt.

Uitgangspunt van dit werk is het werkdocument van Vos [6]. Hierin staan de achtergronden van temperatuurmodellering beschreven, alsmede van de mogelijkheden van verschillende beschikbare modellen. De gewenste uitbreidingen zijn [6]:

- De meteo-parameters moeten als tijdreeksen of eventueel tijdsafhankelijke en ruimteafhankelijke velden kunnen worden ingevoerd;
- Op dit gebied moet worden afgestemd met de gegevens die KNMI kan toeleveren (formaten). Het inlezen van de velden zou kunnen worden toegevoegd aan het programma WAQWND;
- Er moet een koppeling kunnen worden gelegd tussen een innamepunt van bijvoorbeeld een energiecentrale en een lozingspunt, en dit moet ook in parallelle berekeningen worden ondersteund;
- Voor het heat-balance model moet de zonneinstraling worden geprogrammeerd volgens [1], waarbij een methode moet worden bedacht om de breedtegraad mee te nemen;
- Het is gewenst dat het heat-balance model TRIWAQ/TEM, afgeleid van het model van Lane van POL [3], in de moederversie van TRIWAQ wordt geïmplementeerd.

Deze onderwerpen worden in de volgende drie hoofdstukken verder uitgewerkt en geanalyseerd. De groepering die daarbij is gebruikt is dat de afhandeling van de meteo invoer wordt

behandeld in hoofdstuk 2, de koppeling van inname- en lozingspunten (inclusief parallelisatie) wordt behandeld in hoofdstuk 3, en de daadwerkelijke formuleringen voor temperatuur worden beschreven in hoofdstuk 4.

Hoofdstuk 2

Afhandeling van meteo-invoer

Ten behoeve van de temperatuurmodellering zal er extra informatie moeten worden aangeleverd aan WAQUA/TRIWAQ. Concreet betekent dit dat er vier extra grootheden op de wind of flow SDS-file moeten komen. De extra informatie betreft:

- Luchtvochtigheid in procenten.
- Bewolkingsgraad in procenten.
- Temperatuur in Kelvin.
- Zonnestraling in Wattage per vierkante meter.

2.1 Functioneel ontwerp aansturing door de gebruiker

Met betrekking tot wind heeft de gebruiker op dit moment de keuze uit vier opties:

- Geen wind gebruiken;
- opgeven van een constante windsnelheid en -richting;
- opgeven van een tijdserie voor (ruimtelijk) uniforme wind;
- opgeven van een SDS-file met ruimtelijk variërende wind (SVWP).

Deze instellingen moeten in ieder geval gewoon blijven bestaan.

Met betrekking tot temperatuur heeft de gebruiker momenteel slechts één (beperkte) mogelijkheid:

- Opgeven van constante invoerparameters voor het temperatuurmodel.

Bij de uitbreiding van de modellering van temperatuur in WAQUA/TRIWAQ moet het in ieder geval mogelijk worden gemaakt om meteo-gegevens van het KNMI of ECMWF te gebruiken in het temperatuurmodel. Daarnaast kunnen er verschillende vragen worden gesteld over de gewenste functionaliteit:

1. Als de gebruiker een SDS-file met meteo-gegevens opgeeft voor het temperatuurmodel, inclusief windsnelheid, kan hij er dan nog voor kiezen om geen wind te gebruiken in de waterbeweging ?
2. Als de gebruiker een SDS-file met meteo-gegevens opgeeft voor het temperatuurmodel, inclusief windsnelheid, kan hij er dan nog voor kiezen om andere wind (uit een andere wind SDS-file) te gebruiken in de waterbeweging ?
3. Moet een gebruiker ook (ruimtelijk) uniforme reeksen kunnen opgeven voor het temperatuurmodel, voor meer kleinschalige modellen of eenvoudige temperatuurmodellering ?

Overleg met gebruikers (Gerrit Hartsuiker, Erik de Goede) heeft uitgewezen dat de effecten van wind op het temperatuurmodel heel anders zijn dan voor de waterbeweging. Waar de waterbeweging veel meer door de grootschalige patronen (lagedrukgebieden) wordt gestuurd, zijn in de temperatuurmodellering juist vooral kleinschalige variaties van belang. Daarom volstaat het voor de waterbeweging om veel minder frequente invoer op te geven, terwijl er voor het temperatuurmodel een hogere gegevensdichtheid in de tijd is vereist. Daarom is het in principe gewenst om een andere wind SDS-file te kunnen gebruiken dan in het temperatuurmodel wordt gedaan.

Redenerend vanuit consistentie van de gebruikersinvoer en interne structuur van de programmatuur stellen we de volgende keuzes voor:

- De wind SDS-file wordt uitgebreid naar een meteo SDS-file waar naast wind en druk ook de andere gegevens voor het temperatuurmodel kunnen worden gezet.
- In de gebruikersinvoer kan zowel bij de waterbeweging als bij het temperatuurmodel een meteo SDS-file worden opgegeven.
- Vooralsnog stellen we de restrictie voor dat er in een simulatie slechts één meteo SDS-file kan worden gebruikt (de twee namen moeten hetzelfde zijn).
- Voor alle parameters (wind, luchtvochtigheid, temperatuur, e.d.) kunnen er ofwel uniforme ofwel ruimtelijk variabele waarden worden opgegeven.
- Het is mogelijk om voor wind space varying data op te geven terwijl er voor temperatuur (ruimtelijk) uniforme data worden gebruikt en andersom.

De derde keuze wordt ingegeven door enerzijds de onduidelijkheid hoe hard het nodig is om twee aparte SDS-files te kunnen gebruiken, anderzijds de hoeveelheid werk die er met het toevoegen van een tweede SDS-file is gemoeid. Die hoeveelheid werk hangt samen met

- het is onduidelijk hoe goed het SIMONA interpolatietool met verschillende bron-meshes tegelijk om kan gaan (verschillende afmetingen, coördinatenstelsels, tijdstippen meteo-gegevens, etc.);
- de extra SDS-file moet worden gepartitioneerd voor parallele runs, en dit vergt uitbreidingen van COPPRE.

Een voordeel van twee aparte SDS-files is dat de gebruiker oude wind SDS-files kan blijven gebruiken. Daarnaast heeft de gebruiker meer vrijheid in de keuze van zijn bronnen.

Met de voorgestelde keuzes zijn de volgende situaties mogelijk:

- Geen temperatuurmodellering: alle huidige modes voor opgave van wind;
- Eenvoudige temperatuurmodellering: alle huidige modes voor opgave van wind, opgave van tijdreeksen voor overige meteo-invoer;
- Uitgebreide temperatuurmodellering: een SDS-file met meteo-invoer voor het temperatuurmodel, gecombineerd met (ruimtelijk) uniforme wind voor het waterbewegingsmodel;
- Complete modellering: opgave van een (enkele) meteo SDS-file met ruimtelijk variabele wind, druk en overige meteo-gegevens voor zowel de waterbeweging als het temperatuurmodel.

2.2 Ontwerp van de aanpassingen aan WAQWND

2.2.1 Inventarisatie van gegevens van KNMI en ECMWF

De datafiles die door het KNMI / ECMWF worden aangeleverd komen in 2 formaten. Namelijk het Grib en ASCII-formaat. Beide formaten worden momenteel ook al voor wind en luchtdruk gebruikt en kunnen al door WAQWND ingelezen en verwerkt worden. Voor het verwerken van deze files lijken daarom slechts beperkte uitbreidingen nodig te zijn.

Hoewel het inlezen van een Grib file in principe mogelijk moet zijn en in het verleden heeft gewerkt, is dit in een uitgevoerde test niet gelukt. Dit is geprobeerd onder Windows XP met zowel de major release 2006-01 als de update release simona0609. Er is getest met verschillende gribfiles. Hier moet dus nog naar worden gekeken. Er zou ook een test met grib-files aan de Simona testbank moeten worden toegevoegd.

Elk Grib-file bestaat uit 6 secties. Elke sectie heeft zijn eigen functie:

- Sectie 0: Identificatie van de start van het record. Leesbaar, ondanks binaire file;
- Sectie 1: Definitie van het product;
- Sectie 2: Beschrijving van het rooster (optioneel);
- Sectie 3: Bitmap (optioneel);
- Sectie 4: Binaire data;
- Sectie 5: Afsluitende tekenreeks. (7777) Leesbaar, ondanks dat de file binair is.

Elke soort data heeft een eigen kenmerkend getal. Als dit getal bijvoorbeeld 001 is, bevat de file pressure-data. Op deze manier is er dus geen twijfel mogelijk wat de data in de Grib-file voorstelt. De volgende kenmerkende getallen zijn voor ons van belang:

052 : luchtvochtigheid in procenten.

071 : bewolkingsgraad in procenten.

011 : temperatuur in Kelvin.

117 : zonnestraling in Wattage per vierkante meter.

De bovenstaande grootheden kunnen relatief eenvoudig worden toegevoegd aan het systeem dat de Grib-files inleest en verwerkt. De implementatie van de aanpassing zal analoog gaan aan de andere grootheden zoals pressure.

Het is overigens onduidelijk in hoeverre de zonnestraling direct al nodig is. Volgens de Goede is er een veelheid aan gerelateerde definities voor zonnestraling mogelijk, bijvoorbeeld “netto” of “inkomend”. Er moet goed worden opgelet welke grootheid er precies op welk moment wordt gebruikt. Voor de modellen van Sweers en Gill en Lane zijn deze grootheden ook niet nodig, maar wordt de zonnestraling berekend vanuit de breedtegraad en het tijdstip op de dag.

Het ASCII-formaat lijkt op een vereenvoudigde Grib-file. Hier treffen we het zelfde idee aan van secties en kenmerkende getallen voor de grootheid.

Er is ook nog een mogelijkheid om een mask-array van land c.q. water op de meteo SDS-file te zetten. Op deze manier kan met onderscheid maken tussen wind boven water en wind boven het land. Deze informatie is onderdeel van de KNMI-files en kan dus eventueel (later) extra aan de meteo SDS-files worden toegevoegd.

2.2.2 Keuzes m.b.t. coördinatentransformaties

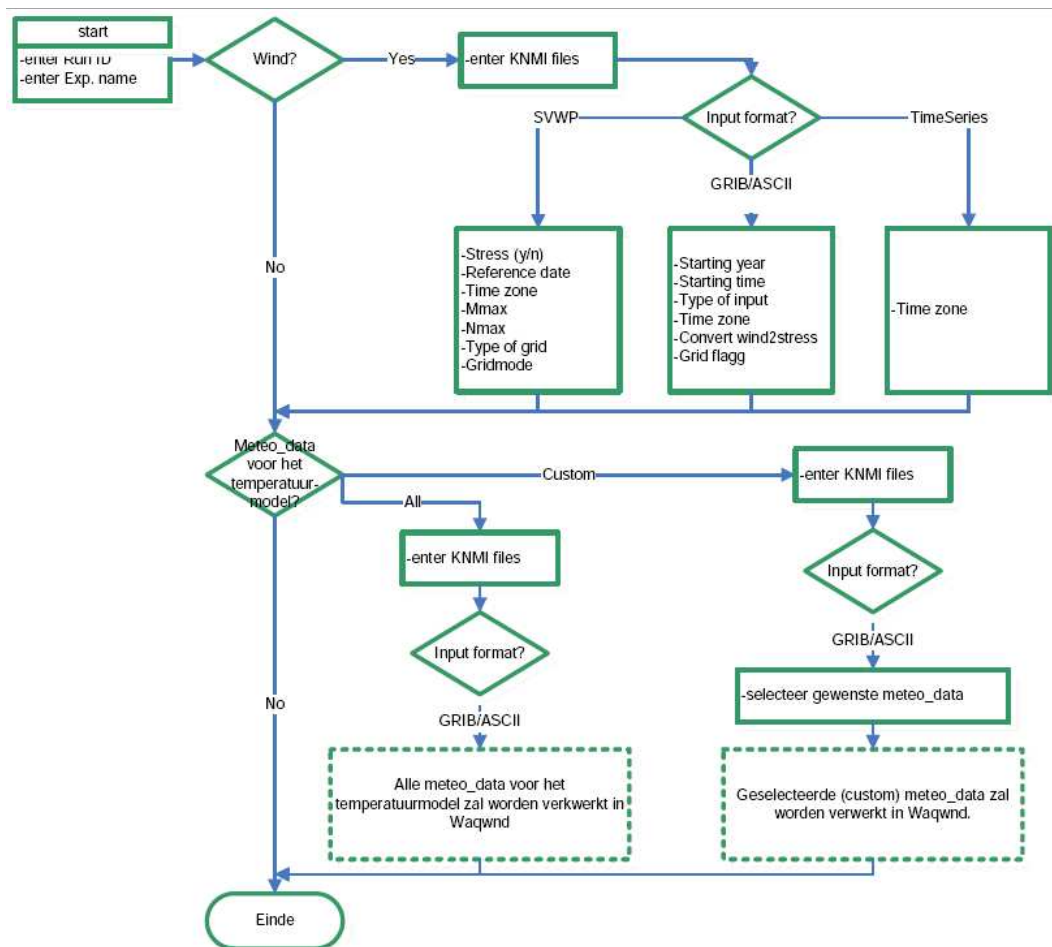
De formuleringen die gebruikt worden in het temperatuurmodel in WAQPRO zijn alleen gemaakt voor Cartesische stelsels. KNMI / ECMWF data die beschreven is volgens het spherische stelsel zal op een of ander moment getransformeerd moeten worden. Qua ontwerp zou het mooist zijn om dit transformeren te doen waar het nodig is. En dit niet op voorhand te doen in WAQWND.

De meteo SDS-file wordt namelijk niet alleen gebruikt als invoer voor WAQPRO, maar ook voor andere applicaties. Het is dus aannemelijk dat gebruikers van WAQVIEW (in de toekomst) de luchtvochtigheid geplot willen zien in het spherische stelsel.

Voor het transformeren van het spherische naar het Cartesische stelsel kan gebruik worden gemaakt van de SIMONA tools bibliotheek. Met name van subroutine `siinxy` voor het transformeren van roosterpunten en routine `siintp` voor het interpoleren van de waarden.

2.2.3 Aansturing van WAQWND door de gebruiker

De bestaande aansturing van WAQWND zal worden uitgebreid met de invoer voor het temperatuurmodel. De volgende situaties zijn mogelijk met de nieuwe aansturing:



Figuur 2.1: Processchema voor afhandeling verschillende situaties in waqwnd.pl.

- Het gebruik van WIND maar geen grootheden betreft temperatuurmodel (bestaande situatie);
- Géén gebruik maken van WIND maar wel een, meerdere of alle grootheden voor het temperatuurmodel;
- Een combinatie van WIND en een, meerdere of alle grootheden voor het temperatuurmodel.

Deze situaties zullen worden afgehandeld met het processchema voor waqwnd.pl van Figuur 2.1.

Als er wordt toegestaan dat er voor WIND andere files worden gebruikt dan voor het temperatuurmodel, dan kan het zijn dat men te maken krijgt met verschillende roosters. Deze kunnen dan alleen in aparte meteo SDS-files worden opgeslagen. Per SDS-file wordt er slechts een enkel rooster toegestaan. Iedere meteo SDS-file moet dan ook met een aparte run van WAQWIND worden aangemaakt.

Compound	Naam van array	Naam van toggle
SOLUTION_HUMIDITY	humidity	ihumid
SOLUTION_CLOUDCOVER	cloud	icloud
SOLUTION_TEMPERATURE	temp	itemp
SOLUTION_RADIATION	radation	iradia

Tabel 2.1: *Nieuwe arrays voor wind SDS-file.*

2.2.4 WAQWND output

Het doel is om uiteindelijk een meteo SDS-file aan te maken waar luchtvochtigheid, bewolgingsgraad, de potentiële temperatuur en de zonnestraling in opgenomen zijn. Om dit te bereiken zullen allereerst de uitvoer-routines van WAQWND aangepast worden. Het gaat hier voornamelijk om de routine `waw001`.

De LDS zal 4 extra arrays krijgen, elk van ($mmax \times nmax$) groot. Daarnaast zullen er nog 4 toggles komen om te controleren welke arrays ook daadwerkelijk aanwezig zijn op de meteo SDS-file. Het gaat om de arrays die zijn weergegeven in Tabel 2.1.

Het voorstel is om de vier data-arrays als aparte stand-alone compound arrays op te slaan. Dit sluit aan bij hoe de wind en luchtdruk worden opgeslagen. Een voorbeeld voor de weergave in het `.dlds`-bestand is:

```

      type='real' dim='(mmax,nmax)'
1      'SOLUTION_HUMIDITY'
        ' humidity'
```

Verder stellen we voor om de toggles op te slaan in een integer array onder `CONTROL_METEO`. Deze naam is gekozen omdat de data rechtstreeks door het KNMI of een ander Europees meteorologisch instituut wordt aangeleverd. De eerste subarray van `CONTROL_METEO` is `ICMETA`. Deze array van integers bevat de toggles. Als het corresponderende data-array gevuld is dan staat de desbetreffende toggle op 1. Is de array echter niet gevuld staat de toggle op 0.

```

1  'CONTROL_METEO
#
      type='int' dim='(20)'
2  'ICMETA'
      dim='(1)'
      'ihumid'  'icloud'  'itemp'  'iradia'  ''
```

Tenslotte wordt het mogelijk gemaakt dat er geen wind en pressure op een meteo SDS-file worden gezet. Daarom moeten er ook hiervoor toggles worden toegevoegd. Deze noemen we `iwind` en `ipres` en worden toegevoegd aan array `ICWINA` van compound `CONTROL_SVWP`:

```

1  'CONTROL_SVWP
#
```

```
        type='int' dim='(20)'
2      'ICWINA'
        dim='(1)'
        'nwtim'   'istres'   'iwind'   'ipres'   ''
```

Er moeten kleine aanpassingen aan `getdata` en `waqview` worden gemaakt om de nieuwe meteo-gegevens te kunnen inspecteren. Dit wordt niet meegenomen in het huidige ontwerp.

2.2.5 Discussie m.b.t. WAQWND

In de voorgaande paragrafen is een samenhangend en redelijk gedetailleerd ontwerp beschreven voor aanpassing van WAQWND. Dat ontwerp sluit aan bij de huidige structuur van dat programma. Er zou echter ook een andere aanpak kunnen worden bedacht.

Een alternatieve aanpak zou gewenst kunnen zijn om de volgende redenen:

- Het programma WAQWND is een samenraapsel van verschillende functies. Het heeft een hele trits command-line opties en het is voor een nieuwe gebruiker onduidelijk wat de rol overal van is.
- De meteo SDS-file zou kunnen worden uitgebreid tot een “database van meteogegevens”. Gebruikers zouden zo’n database voor verschillende toepassingen moeten kunnen gebruiken. Ze moeten hem dan flexibel kunnen vullen met data van verschillende bronnen, inclusief verschillende grids of opgave via tijdseries.

Een alternatieve aanpak zou kunnen uitgaan van een nette keyword-gestuurde invoerfile voor WAQWND. Via deze invoerfile zou de gebruiker alle mogelijkheden van WAQWND moeten kunnen aansturen. Deze mogelijkheden worden kort samengevat als het converteren van meteo-gegevens uit allerlei bronnen naar een enkele SDS-file toe. Bij deze mogelijkheden zit ook het kunnen opgeven van meteo-gegevens via tijdreeksen. Verder lijkt het ons gewenst om een rooster te kunnen definiëren en daar de wind op te geven via het SIMONA box-mechanisme.

Met deze keyword-gestuurde invoerfile worden bepaalde stukken uit de simulatie invoerfile van WAQPRE overbodig gemaakt. Dit kan ook bewust worden nagestreefd, door alle mogelijkheden van de `siminp`-file over te nemen in WAQWND. Het lijkt zelfs mogelijk om dezelfde arrays op de meteo SDS-file aan te maken als nu op de WAQUA SDS-file worden gebruikt, en om dan dezelfde subroutines te gebruiken voor het inlezen en verwerken van deze keywords uit de `siminp`-file. Verder kan de afhandeling in WAQPRO dan eenvoudig switchen afhankelijk van welke SDS-file er voor de meteo-gegevens wordt gebruikt.

Deze alternatieve aanpak biedt goede mogelijkheden voor het vergemakkelijken van het gebruik van WAQWND en voor de verdere uitbouw hiervan. Ze vergt echter wel een flinke inspanning (ruwe schatting: drie weken) en wordt daarom vooralsnog buiten beschouwing gelaten in dit rapport.

2.3 Ontwerp van de aanpassingen aan WAQPRE

Het functionele ontwerp dat is besproken in paragraaf 2.1 vraagt een aantal aanpassingen aan WAQPRE:

- Mogelijk maken van tijdreeksen voor meteo-parameters van het temperatuurmodel;
- Mogelijk maken van het opgeven van een meteo SDS-file voor het temperatuurmodel.

Er worden wel een aantal sleutelwoorden toegevoegd aan de invoer van WAQPRE. Daarom zal de reference file `waquaref.tab` wel aangepast moeten worden.

Bij de keuze voor het geavanceerdere temperatuurmodel moet men dus ook een meteo SDS-file en een experimentnaam op geven. WAQPRE zal moeten controleren dat een meteo SDS-file die gespecificeerd is als onderdeel van de temperatuurmodellering, ook daadwerkelijk de betreffende meteo-gegevens bevat.

2.3.1 Specificatie van meteo-invoer in de `siminp-file`

Met betrekking tot de nieuwe keywords voor meteo-gegevens in de simulatie invoerfile zijn er een heleboel, deels tegenstrijdige overwegingen:

- Je zou de nieuwe meteo-gegevens bij de huidige wind willen zetten (onder hoofdkeyword GENERAL);
- Je zou voor het onderscheid tussen tijdseries en ruimtelijk variabele invoer willen aansluiten bij de opgave van wind (aparte keywords WIND en SPACE_VAR_WIND);
- Je zou willen aansluiten bij de huidige invoer voor het temperatuurmodel (constante waarden meteo-parameters onder TRANSPORT - PROBLEM - TEMPERATURE, tijdseries onder TRANSPORT - FORCINGS - TEMPERATURE - INITIAL en - TIME SERIES);
- Je wilt invoer voor verschillende procesmodellen zo veel mogelijk in aparte hoofdkeywords opgeven (temperatuur naar hoofdniveau);
- Je wilt bestaande invoer zo veel mogelijk blijven ondersteunen (temperatuur onder transport, wind onder general);
- Je wilt dat de nieuwe keuzes robuust zijn voor toekomstige uitbreidingen van het systeem (nieuwe procesmodellen, bijv. voor meteo);
- Je wilt keywords die flexibel genoeg zijn voor alle voorziene invoercombinaties (aparte meteo SDS-files per grootheid, en verschillende wind voor flow en temperatuur);
- Je wilt veel-voorkomende situaties met zo min mogelijk regels invoer kunnen specificeren (een enkele meteo SDS-file voor alle grootheden);

De grootste spanning zit in het opgeven van meteo-invoer onder hoofdkeyword GENERAL versus het apart kunnen opgeven van wind voor flow en wind voor het temperatuurmodel.

Als je het standpunt inneemt dat de meteo-gegevens specifiek voor een procesmodel zijn, dan horen ze nooit onder GENERAL te staan en komen de nieuwe gegevens onder TRANSPORT - PROBLEM - TEMPERATURE. Eigenlijk zou de wind dan ook onder FLOW moeten worden gezet (zie bijvoorbeeld de parameters voor overdracht, CDA en CDB). Dit standpunt heeft verschillende nadelen:

1. De opgave van temperatuur wordt te omvangrijk om onder TRANSPORT te blijven staan;
2. Je kunt de opgave van wind niet meer veranderen vanwege het zeer omvangrijke gebruik hiervan in bestaande invoerfiles.

Ons idee is dat de meteo-gegevens in de toekomst ook voor andere procesmodellen nuttig kunnen zijn: verdamping, ecologie, e.d. Verder is het uiteindelijk zo dat er maar één echte windsnelheid bestaat. Als deze in alle detail wordt opgegeven dan kunnen alle afgeleiden voor verschillende procesmodellen hieruit via conversies worden afgeleid (smoothing in de tijd, aggregatie, sampling). Daarom is het gewenst om de meteo-gegevens onder GENERAL te kunnen opgeven. Dit sluit ook het beste aan bij de huidige invoermogelijkheden voor wind. We stellen voor dat er onder TEMPERATURE een keyword ALT_WIND (“MY_WIND”) wordt toegevoegd, waarin de algemene wind kan worden overruled. Dit principe kan ook voor andere grootheden en andere procesmodellen worden gebruikt.

Voor de opgave van meteo-gegevens wordt voorgesteld om onder GENERAL het optional sleutelwoord METEO_DATA toe te voegen, met de volgende invulling:

```

METEO_DATA
  SDS_METEO = [text]           (optional, default SDS-file for all quantities)
  EXP_METEO = [text]
  AIR_TEMP
    TUNIT = [text]
    TEMP_OFFSET = [val]        (evt. conversie van Kelvin naar Celsius)
    TEMP_MULTFACT = [val]     (evt. andere conversies)
    | T_AIR = [val]           (constant value)
  <
    | SERIES='regular' | 'irregular'
    | | FRAME=[val1] [val2] [val3]           (i.c. series='regular')
    | | VALUES= < ([val1] [val2]) >       (i.c. series='regular')
    | <
    | | <TIME_AND_VALUES=[tval] [val1] [val2]> (i.c. series='irregular')
  <
    | USE_METEO_SDS           (refer to general meteo SDS, default)
  <
    | SDS_AIR_TEMP = [text]   (use specific SDS, not yet implemented)
    | EXP_AIR_TEMP = [text]

```

```

HUMIDITY
  HUNIT = [text]
  | R_HUMIDITY = [val]                                (constant value)
  <
  | SERIES = 'regular' | 'irregular'
  | | FRAME = [val1] [val2] [val3]                   (i.c. series='regular')
  | | VALUES = < ([val1] [val2]) >                 (i.c. series='regular')
  | <
  | | <TIME_AND_VALUES=[tval] [val1] [val2]> (i.c. series='irregular')
  <
  | USE_METEO_SDS                                     (refer to general meteo SDS, default)
  <
  | SDS_HUMIDITY = [text]                             (use specific SDS, not yet implemented)
  | EXP_HUMIDITY = [text]
CLOUD_COVER
  CUNIT=[text]
  | T_CLOUD_COVER = [val]                             (constant value)
  <
  | SERIES = 'regular' | 'irregular'
  | | FRAME = [val1] [val2] [val3]                   (i.c. series='regular')
  | | VALUES = < ([val1] [val2]) >                 (i.c. series='regular')
  | <
  | | <TIME_AND_VALUES=[tval] [val1] [val2]> (i.c. series='irregular')
  <
  | USE_METEO_SDS                                     (refer to general meteo SDS, default)
  <
  | SDS_CLOUDCOV = [text]                             (use specific SDS, not yet implemented)
  | EXP_CLOUDCOV = [text]
SOLAR_IRRADIATION
  SUNIT=[text]
  | S_SOLAR = [val]                                   (constant value)
  <
  | SERIES = 'regular' | 'irregular'
  | | FRAME = [val1] [val2] [val3]                   (i.c. series='regular')
  | | VALUES = < ([val1] [val2]) >                 (i.c. series='regular')
  | <
  | | <TIME_AND_VALUES=[tval] [val1] [val2]> (i.c. series='irregular')
  <
  | USE_METEO_SDS                                     (refer to general meteo SDS, default)
  <
  | SDS_SOLAR_IRRAD = [text]                         (use specific SDS, not yet implemented)
  | EXP_SOLAR_IRRAD = [text]

```

In deze invoer kan er eerst een algemene meteo SDS-file worden aangegeven. Vervolgens zijn er per grootheid configuratie-opties (m.n. eenheid) en vier invoer-opties:

1. constante waarde;
2. tijdserie (ruimtelijk constant);
3. verwijzing naar de algemene meteo SDS-file;
4. opgave van een specifieke meteo SDS-file.

Met deze invoer kunnen alle meteo-gegevens in geval van een enkele meteo SDS-file met drie regels worden opgegeven, maar ook volledig flexibel worden geconfigureerd.

De vierde optie per grootheid wordt vooralsnog niet geïmplementeerd. Enerzijds omdat ze de invoer voor de gebruiker complexer maakt, anderzijds omdat ze niet snel nodig zal zijn. Ze is wel meegenomen in het ontwerp om ervoor te zorgen dat deze uitbreiding in de toekomst op een logische manier in de huidige structuur kan worden gepast.

Eventueel kan de huidige invoer voor wind ook onder het nieuwe keyword worden gebracht. Daarbij kunnen de oude keywords vooralsnog blijven bestaan ter ondersteuning van bestaande invoerfiles. Dit wordt niet verder uitgewerkt in dit rapport.

2.3.2 Toevoegingen aan de WAQUA/TRIWAQ SDS-file

Aan de array `COEFF_GENERAL_ICGENA` wordt de flag `imeteo` en variabelen `nothum`, `notclo`, `nottmp`, `notslr`, `notwnd` toegevoegd. Als de flag `imeteo` op 1 staat zijn de meteo gegevens ruimte afhankelijk beschikbaar en worden de arrays met luchtvochtigheid, bewolgingsgraad, temperatuur en zonnestraling van de meteo SDS-file gelezen.

De globale waarden en de tijdreeksen met de meteo gegevens worden opgeslagen onder het keyword `COEFF_GENERAL`. Hiervoor wordt het sub-array `METEO` toegevoegd. En onder dit keyword zijn de genoemde grootheden te vinden. Het aantal waarden in de tijdreeksen wordt gegeven door de variabelen `nothum`, `notclo`, `nottmp`, `notslr` en `notwnd`.

De naam van de meteo SDS-file en de experimentnaam worden opgeslagen in de variabelen `meteosds` en `meteoexp`.

Onderstaand wordt een voorbeeld voor onderdelen van de nieuwe LDS structuur gegeven.

```
#
1  'COEFF_GENERAL'
#
    type='int'   dim='(offset=20)'
2  'ICGENA'
    dim='(1)'
    'notgwn'   'isvwp'   'icdflg'   'iwlopf'   'imeteo'   'nothum'
    'notclo'   'nottmp'   'notslr'   'notwnd'
...
    type='real' dim='(offset=2+3*notgwn)'
2  'WIND'
    dim='(1)'
```

```

        'pwindi'  'pwinai'

        dim='(time=notgwn)'
        'timdis'  'pwind'  'pwinda'
#
        type='real'
        dim='(offset=6+2*nothum+2*notclo+2*nottmp+2*notslr+3*notwnd)'
2  'METEO'
        dim='(1)'
        'phumi'  'pcloudi'  'ptempi'  'psolari'  'twindi'  'twindai'

        dim='(time=nothum)'
        'timhum'  'phum'

        dim='(time=notclo)'
        'timclo'  'pcloud'

        dim='(time=nottmp)'
        'tintmp'  'ptemp'

        dim='(time=notslr)'
        'timslr'  'psolar'

        dim='(time=notwnd)'
        'timwnd'  'twind'  'twinda'
#
        type='char*256'  dim='(offset=10)'
2  'IREFME'
        dim='(1)'
        'meteosds'  'meteoexp'
        dim='(8)'  ''

```

2.3.3 Specificatie van het temperatuurmodel in de siminp-file

De huidige invoer voor het temperatuurmodel (TRANSPORT - PROBLEM - TEMPERATURE) conflicteert met de opgave van meteo-gegevens onder GENERAL. Verder wordt het temperatuurmodel op dit moment nog nauwelijks in simulatie invoerfiles gebruikt (het staat niet eens in de users guide vermeld). Daarom stellen we voor om dit gedeelte gelijk grondig te herzien en goed te maken:

1. Toevoegen van een nieuw keyword HEATEXCHANGE op het hoofdniveau. Onder het bestaande TRANSPORT - TEMPERATURE wordt alleen het constituent number voor temperatuur opgegeven;
2. Vervangen van de numerieke waarden voor het temperatuurmodel door namen (bijv. TEMPMODEL = 'SWEERS76' in plaats van TEMPMODEL = 3);

3. Verwijderen van de meteo-parameters uit de bestaande invoer m.b.t. temperatuur;
4. Toevoegen van de mogelijkheid om alternatieve windsnelheid te kunnen opgeven, afwijkend van de wind onder GENERAL;
5. Toevoegen van enkele parameters die in verschillende situaties verschillend kunnen zijn: Stanton getal, Dalton getal, Sechi diepte.

Opmerking: de naam HEATEXCHANGE geeft aan dat niet zozeer de modellering van temperatuur onder dit keyword wordt beschreven, maar de uitwisseling van energie tussen de lucht (meteo-invoer) en het water (transportmodel).

De invoer zou er als volgt uit kunnen zien:

```

TRANSPORT
  PROBLEM
    ...
    TEMPERATURE
      CO <int>

HEATEXCHANGE
  GENERAL
    MY_WINDSPEED
      SUNIT = [text]
      | CONST_VAL = [val] (constant value)
    <
      | SERIES = 'regular' | 'irregular'
      | | FRAME = [val1] [val2] [val3] (i.c. series='regular')
      | | VALUES = < ([val1] [val2]) > (i.c. series='regular')
      | <
      | | <TIME_AND_VALUES=[tval] [val1] [val2]> (series='irregular')
    <
      | SDS_WIND = [text] (use specific SDS, not yet implemented)
      | EXP_WIND = [text]

SWEERS76
  AREAWATER = <rval>
  BACKGR_TEMP = <rval>

LUDIKHUIZE96
  SOLAR_REFL = 0.06

LANE_GILL89
  SOLAR_REFL = 0.06
  DALTON_CONST = 0.0015
  STANTON = 0.00145

```

De precieze invulling van deze hoofdstukjes zal worden uitgewerkt bij het daadwerkelijk invoeren van de parameters in de programmatuur.

2.3.4 Documentatie WAQPRE

In het algemene gedeelte van de User's guide van WAQUA zullen de nieuwe mogelijkheden met betrekking tot temperatuurmodellering (beknopt) worden toegelicht.

De gebruikersdocumentatie van WAQPRE zal aangepast worden op de nieuwe sleutelwoorden. Er zal een paragraaf Temperatuur worden toegevoegd aan hoofdstuk 2.7.

De uitbreidingen van de LDS van WAQUA (naam meteo SDS-file, tijdseries temperatuurmodel) zullen worden beschreven in de relevante paragrafen van de LDS FLOW en LDS TRANS.

2.3.5 Aanpassing van IPW

De aanpassingen aan de simulatie-invoerfile zouden ook moeten worden verwerkt in een nieuwe versie van IPW. Dat wordt vooralsnog buiten beschouwing gelaten totdat de wijzigingen definitief zijn gemaakt en zijn geïmplementeerd.

2.4 Testen

Nadat de wijzigingen in WAQWND zijn doorgevoerd zal de bestaande en nieuwe functionaliteit getest moeten worden. Allereerst zal een regressietest uitgevoerd worden. Daarna zal de nieuwe functionaliteit getest worden.

Als regressietest zal er 1 som gedraaid worden met een SVWP-file als invoer. Er wordt dan getest met zowel de bestaande als de nieuwe WAQWND. Daarna zal een tweede som gedraaid worden met zowel de bestaande als de nieuwe WAQWND, maar dan met met een ASCII-file als invoer.

De verschillen in resultaten zullen met `getdata` bekeken worden. Als het goed is moeten de verschillen nagenoeg 0 zijn.

Ter validatie van de nieuwe functionaliteit van WAQWND moeten de door KNMI / ECMWF aangevoerde data worden vergeleken met de data die uiteindelijk op de wind SDS-file staat. Deze data zal ook overeen moeten komen. Ook deze keer zullen er weer 2 tests gedaan worden. Maar nu met een ASCII-file van het KNMI en een GRIB-file van het ECMWF. De grootheden worden met `getdata` uit de wind SDS-file gehaald en vergeleken met de originele invoer.

De ASCII- en GRIB-files inclusief de 4 nieuwe grootheden moeten nog aangeleverd worden. Het liefst zouden we beide files willen hebben, met exact dezelfde informatie. Op die manier kan de meteo SDS-file met een ASCII-file als invoer, vergeleken worden met de meteo SDS-file met een GRIB-file als invoer.

Hoofdstuk 3

Koppeling van inname- en lozingspunten

3.1 Gewenste functionaliteit van “powerstations”

De onttrekking en lozing van koelwater moeten “gekoppeld” kunnen worden gesimuleerd. In de huidige versie van de TRIWAQ programmatuur ontbreekt deze koppeling. Dit is vooral lastig in situaties waarbij de zoutlast van de lozing een groot effect heeft op de verspreiding van de koelwaterpluim. De zoutconcentratie ter plaatse van de onttrekking is niet een vaste waarde maar wordt bepaald door de actuele condities. Hierbij spelen de aanvoer en afvoer van water een overheersende rol.

Bij een ontkoppeling van een onttrekking en een lozing is het bepalen van de zoutconcentratie bij de onttrekking in feite een iteratief proces (en dus tijdrovend). Een gekoppelde onttrekking en lozing moet in staat zijn de concentraties van de gesimuleerde stoffen “door te geven”. hierbij moet de mogelijkheid bestaan ingrepen te plegen in de concentraties om bijvoorbeeld een extra warmtelast aan de lozing toe te kennen.

Een dergelijke mogelijkheid heeft vroeger wel in WAQUA bestaan. Daarvoor werd de benaming “powerstations” gebruikt. Een powerstation bestaat uit twee verschillende bronpunten (“discharges”) die op een bepaalde manier aan elkaar gekoppeld zijn.

Voor de koppeling tussen lozingen en onttrekkingen zijn verschillende strategieën mogelijk. Hiermee kunnen misschien verschillende andere situaties worden afgedekt. We stellen de volgende strategie voor:

- We nemen aan dat het debiet in het lozingspunt steeds precies even groot is als het debiet in het innamepunt op hetzelfde moment (geen tijdvertraging);
- we nemen aan dat de concentraties van getransporteerde stoffen (zout, temperatuur, verontreiniging) in het innamepunt gelijk zijn aan de lokale concentraties in het model (geen filtering);
- we nemen aan dat de concentraties van getransporteerde stoffen bij de lozing gelijk zijn aan de concentratie van de inname op hetzelfde moment plus een verhoging/verlaging.

(De resulterende concentratie, bijvoorbeeld temperatuur van het geloosde water, is niet rechtstreeks te specificeren. Dit kan later worden toegevoegd.)

Deze algemene strategie zal worden beschreven in het “general” gedeelte van de users guide van WAQUA.

3.2 Voorgestelde uitbreiding van de gebruikersinvoer

Lozingen en onttrekkingen worden nu in WAQUA/TRIWAQ als volgt door de gebruiker opgegeven:

- In het algemene gedeelte van de invoer (MESH - POINTS) definiëert de gebruiker “punten” waarop iets gebeurt;
- In het flow-gedeelte van de invoer definiëert de gebruiker lozingspunten (bronnen), en geeft tijdseries voor het bijbehorende debiet (FLOW - FORCINGS - DISCHARGES). Een negatief debiet betekent dat het feitelijk om een onttrekking gaat;
- In het transportgedeelte van de invoer definiëert de gebruiker lozingspunten, en geeft de bijbehorende concentraties van opgeloste stoffen in de lozingen (TRANSPORT - FORCINGS - DISCHARGES). De bronpunten die hier worden opgegeven moeten precies overeenkomen met de punten die in het FLOW-gedeelte zijn gebruikt. Deze concentraties worden gebruikt wanneer het corresponderende debiet positief is. Bij een onttrekking wordt de actuele concentratie uit het model gebruikt.

In de oude implementatie van powerstations in WAQUA werd de koppeling tussen bepaalde sources en sinks pas in het transportgedeelte van de invoer gelegd. Dit vinden we niet zo praktisch omdat er dan geen eenduidig model aan de gebruiker wordt gepresenteerd: enerzijds zijn verschillende punten aparte bronnen (in het FLOW-gedeelte), anderzijds zijn ze aan elkaar gerelateerd (in het TRANSPORT-gedeelte).

Het volgende lijkt ons een betere methode voor de invoering van POWERSTATIONS:

- in het algemene gedeelte van de invoer wordt onder MESH een hoofdstukje POWERSTATIONS gemaakt. Per powerstation worden twee punten opgegeven (INTAKE en OUTLET) en kan een naam worden gespecificeerd. De afhandeling hiervan is vergelijkbaar met “CURVES” of “OPENINGS”;
- in het flow-gedeelte van de invoer moet onder “DISCHARGES” voor een van beide punten van het powerstation het debiet worden opgegeven. Dit moet altijd positief zijn, de richting van de stroming volgt uit de betekenis van het punt;
- in het transport-gedeelte van de invoer voegen we onder FORCINGS een nieuw hoofdstukje POWERSTATIONS toe. Hierbij kan per powerstation en per getransporteerde grootheid de verhoging (positief) of verlaging (negatief) van de concentratie door het powerstation worden gespecificeerd.

Een alternatief voor het expliciet opgeven welk punt de intake en welke de outlet is, is om dit af te leiden uit het teken van het opgegeven debiet. Daarbij zou dit ook kunnen variëren in de tijd. We zien hier echter geen praktische toepassingen voor.

We stellen voor om de verhoging/verlaging per getransporteerde stof te laten specificeren via een tijdserie. Dit is relatief eenvoudig te maken omdat er al veel andere tijdseries in WAQUA/TRIWAQ zijn geïmplementeerd. Een alternatief is om vooralsnog alleen een constante waarde aan te bieden aan gebruikers. Dat is een of twee dagen minder werk.

De nieuwe keywords zullen worden gedocumenteerd in de users guide WAQPRE. Ook zullen de powerstations (kort) worden vermeld in het algemene gedeelte van de users guide WAQUA.

3.3 Implementatie in WAQPRE

Voorheen werden powerstations geïdentificeerd met de eerste `2*nopow` bronnen van het model. Dit kunnen we nu weer maken, maar dat levert mogelijk problemen in de parallelisatie op. We stellen daarom de volgende aanpak voor:

- Het aantal powerstations wordt `nopow` genoemd. Dit wordt opgeslagen in `MESH_IDIMEN(38)`. De oude waarde uit `CONTROL_FLOW_ICONTA(1)` wordt gewist;
- De namen van powerstations worden toegevoegd aan `MESH_NAMMSH`;
- Per powerstation worden er twee bronnen toegevoegd (variabele `nsrc` in `CONTROL_FLOW_ICONTA(2)`, coördinaten in arrays `mdis`, `ndis` en `kdis` in `PROBLEM_FLOW_IDISCH`);
- Er wordt een nieuw array `ixpw2s(nopow,2)` gemaakt met per powerstation de indices van de betrokken sources en/of een array `ixs2pw(nsrc)` met per source het nummer van het powerstation waar het sourcepunt bij hoort;
- De debieten per powerstation worden twee keer, voor inname- en lozingspunt apart, opgeslagen in array `disch` (`FORCINGS_FLOW_DISCHT`). In de kopie wordt het teken verwisseld ten opzichte van het origineel;
- De extra bronnen worden ook toegevoegd in de administratie van het transportgedeelte (arrays `CONTROL_TRANS_ICONTA` en `PROBLEM_TRANS_IDISCH`);
- Voor de bronpunten van powerstations mogen in het transportgedeelte geen concentraties worden opgegeven;
- De opgegeven verhoging van de concentratie per powerstation (tijdserie) wordt opgeslagen op de plek waar anders de daadwerkelijke concentraties zouden worden gezet (`FORCINGS_TRANS_DISCHT`), en worden bij beide bronpunten opgeslagen.

De aanpassingen en nieuwe arrays zullen worden gespecificeerd in de LDS-beschrijvingen “FLOW” en “TRANS” van WAQUA.

3.4 (Numerieke) afhandeling in WAQPRO

Via extra subroutine-argumenten worden de gegevens over powerstations doorgegeven aan de rekenroutines van WAQUA en TRIWAQ.

In het flow-gedeelte van WAQUA/TRIWAQ hoeft niets te worden aangepast omdat de debieten van de inname en lozing aan elkaar gelijk zijn en door de gebruiker in de invoerfile zijn gespecificeerd. Met de methode om deze debieten voor twee bronpunten apart op te slaan kunnen de twee punten als gewone, onafhankelijke bronnen worden behandeld.

In de transportgedeeltes van WAQUA en TRIWAQ moeten wel aanpassingen worden gemaakt om de gewenste koppeling te realiseren. Hiervoor zijn twee verschillende strategieën mogelijk: *expliciet* en *impliciet*.

1. De expliciete methode bestaat eruit dat de concentratie van het innamepunt aan het begin van de halve tijdstap wordt uitgelezen. Met de verhoging/verlaging door het powerstation erbij geeft dit de concentratie waarmee in het lozingspunt wordt geloosd.
2. De impliciete methode bestaat eruit dat ernaar wordt gestreefd om de concentratie van de lozing gelijk te maken aan de concentratie in het innamepunt op het nieuwe tijdsniveau plus verhoging/verlaging.

De moeilijkheid met de impliciete methode is dat er een extra afhankelijkheid in de vergelijkingen wordt geïntroduceerd. In WAQUA komen er uit de discretisaties penta-diagonale stelsels vergelijkingen:

$$e_{m,n}c'_{m-2,n} + a_{m,n}c'_{m-1,n} + b_{m,n}c'_{m,n} + c_{m,n}c'_{m+1,n} + f_{m,n}c'_{m+2,n} = d_{m,n} \quad (3.1)$$

Hierin zijn $a_{m,n}$ tot en met $f_{m,n}$ de coëfficiënten van de vergelijking voor roosterpunt (m,n) en zijn de c' 's de concentraties van opgeloste stoffen in verschillende roosterpunten op het nieuwe tijdstip. Als er een impliciete koppeling tussen het inname- en lozingspunt wordt nagestreefd dan wordt de vergelijking in het lozingspunt:

$$e_{m,n}c'_{m-2,n} + a_{m,n}c'_{m-1,n} + b_{m,n}c'_{m,n} + c_{m,n}c'_{m+1,n} + f_{m,n}c'_{m+2,n} = d_{m,n} + \text{disch}_{m,n}c'_{mi,ni} \quad (3.2)$$

Hierin is $\text{disch}_{m,n}$ de hoeveelheid water die in een halve tijdstap wordt geloosd, en is $c'_{mi,ni}$ de (initiële nog onbekende) concentratie in het innamepunt.

Omdat het innamepunt op een heel andere lokatie in het grid kan zitten verliest het stelsel vergelijkingen hiermee zijn eenvoudige structuur van onafhankelijke penta-diagonale stelsels per rij. Dit kan dan alleen praktisch via een iteratieproces worden opgelost. Aan het begin van iedere iteratie wordt de concentratie van het innamepunt uitgelezen en gebruikt als basis voor de concentratie in het lozingspunt. Dit iteratieproces zal snel convergeren, tenzij er een terugkoppeling bestaat van de concentratie in het lozingspunt naar het innamepunt. De convergentie kan worden versneld door een Gauss-Seidel benadering uit te werken: eerst de rijen met innamepunten verwerken, en daarna de rijen met lozingspunten. Dit verhoogt echter wel de complexiteit van de code, met name door de benodigde ondersteuning voor parallel rekenen en de combinatie met het stop-criterium per rij.

De expliciete methode is een stuk gemakkelijker te implementeren, maar kan numerieke artefacten opleveren. Als de inname impliciet wordt verwerkt, door **disch** af te trekken van $\mathbf{b}_{m,n}$, dan wordt er niet precies aan massabehoud voldaan. De hoeveelheid stof die wordt onttrokken aan het model is dan $\mathbf{disch} c'_{mi,ni}$, terwijl er aan de andere kant $\mathbf{disch} c_{mi,ni}$ wordt geloosd. Hierin zitten concentraties op verschillende tijdsniveaus. Dat is niet erg in geval van een verhoging/verlaging, maar kan wel problematisch zijn voor tracers die niet worden gewijzigd in de centrale.

Een aanpassing voor dit laatste probleem is om de inname expliciet te verwerken, door $\mathbf{disch} c_{mi,ni}$ op te tellen bij $\mathbf{d}_{m,n}$. Dit kan in bepaalde gevallen concentratiepieken opleveren, met name wanneer er een relatief groot deel van het water uit een cel onttrokken wordt. De hoeveelheid massa die onttrokken wordt past dan niet goed bij het volume en de (nieuwe) concentratie in de cel. Alsof er met een membraan gefilterd wordt. De concentratie in het achterblijvende water kan hierdoor worden verhoogd.

Het is onduidelijk hoe ernstig het laatste probleem met de expliciete methode is. We stellen daarvoor de volgende methode voor:

- Aan het begin van de transportberekening worden de concentraties van innamepunten uitgelezen en bij de lozingspunten ingevuld;
- bij gewone bronnen (niet gerelateerd aan powerstations) wordt een lozing expliciet verwerkt (in rechterlid $\mathbf{d}_{m,n}$) en een inname impliciet verwerkt (in linkerlid $\mathbf{b}_{m,n}$);
- bij bronnen van powerstations worden innames en lozingen beiden expliciet verwerkt in het rechterlid $\mathbf{d}_{m,n}$.

Deze methode is bovendien voordelig voor de parallellisatie, omdat er maar een keer extra per halve tijdstap hoeft te worden gecommuniceerd. Dit wordt uitgewerkt in de volgende paragraaf.

Bij het testen van de powerstations zou er wel specifieke aandacht aan deze keuze moeten worden besteed. Er zou moeten worden gekeken of de methode zich goed gedraagt bij een relatief grote inname in een roostercel wanneer er een relatief grote tijdstap wordt gebruikt.

Indien er zich bij het testen of later bij het gebruik van de nieuwe functionaliteit (ernstige) stabiliteitsproblemen voordoen dan kan er alsnog een impliciete methode worden geïmplementeerd.

3.5 Parallellisatie-aspecten van powerstations

Powerstations introduceren een koppeling tussen roosterpunten die in principe ver van elkaar verwijderd kunnen zijn. Dit betekent dat de punten in verschillende subdomeinen van een parallele berekening terecht kunnen komen, dus dat er speciale aanpassingen voor parallele berekeningen nodig kunnen zijn.

Bij de parallellisatie van WAQUA in 1998 is hier specifiek over gediscussieerd. Er was toentertijd geen goede strategie voor de ondersteuning van powerstations in parallele berekeningen,

en omdat de functionaliteit (vrijwel ?) niet werd gebruikt is er toen besloten geen powerstations te ondersteunen in parallelle runs.

Inmiddels is er wel een geschikte strategie voorhanden. Deze kan worden afgeleid van de strategie die voor dynamische barrieresturing wordt gebruikt. Ook daar is er een koppeling tussen verschillende, mogelijk ver verwijderde roosterpunten mogelijk: een punt waar de stromingstoestand wordt opgenomen ten behoeve van de sturing van een barrier op een andere lokatie.

De strategie die we voorstellen voor de benodigde communicatie is:

- We introduceren een werkkarray `rppow(nopow, lmax)`. Hierin is `nopow` het globale aantal powerstations, het totaal van alle subdomeinen van een parallelle berekening samen;
- aan het begin van de transportberekening vult ieder subdomein de concentraties van “zijn” innamepunten in;
- het array `rppow` wordt via globale communicatie uitgewisseld tussen alle subdomeinen die punten van powerstations bevatten;
- vervolgens kunnen de berekening voor innames en lozingen onafhankelijk van elkaar worden uitgevoerd.

Qua infrastructuur zijn hiervoor de volgende voorzieningen nodig/gewenst:

- In `coplds.waqua` moet de index-set `NOPOW` worden toegevoegd ten behoeve van arrays met lengte `nopow`. Deze index-set hoeft niet te worden gedistribueerd maar wordt in zijn geheel naar alle subdomeinen toe gekopieerd;
- Voor het vullen van `rppow` heeft ieder subdomein de mapping van zijn eigen bronpunten naar globale powerstation-nummers nodig. Dit kan goed worden gedaan door de administratie van powerstations (`ixs2pw(nsrc)`) te distribueren (via distributie van `nsrc`) en geen correctie te doen op de inhoud hiervan. Verder wordt bij het vullen van `rppow` het teken van het debiet gebruikt om te bepalen wat het inname- en het lozingspunt is;
- Voor de globale communicatie wordt een nieuwe procesgroep “`havepowerst_owndomain`” geïntroduceerd. Hierin nemen alleen subdomeinen deel die bronnen behorend bij powerstations bezitten. De communicatie wordt hiermee geoptimaliseerd;

Met deze strategie is er relatief weinig speciale code nodig en hoeft er maar een enkele kleine communicatieslag per halve tijdstap extra te worden gedaan.

In deze strategie is ervan uitgegaan dat de intake en outlet van een enkel powerstation zich in hetzelfde domein van een domeindecompositieberekening bevinden. Binnen deze restrictie is het mogelijk om de powerstations te gebruiken in combinatie met domein decompositie. Het kan later ook mogelijk worden gemaakt om de intake en outlet ver uit elkaar te leggen, in verschillende domeinen. Het is echter niet duidelijk of dit ook praktisch nuttig is.

Deze paragraaf zal te zijner tijd worden overgenomen in het detail ontwerp over domein decompositie en parallel rekenen in WAQUA/TRIWAQ [5].

3.6 Beoogde testen voor de nieuwe functionaliteit

Voor het evalueren van de powerstations lijken de volgende testen van belang:

- eenvoudige bakjes met powerstation. Hiervoor kunnen de testen uit paragraaf 3.5 van [2] worden gebruikt;
- een schematisatie met een powerstation erin met temperatuur en een tracer met verhoging voor de ene “stof” (temperatuur) en niet voor de andere (tracer);
- testen van parallel rekenen: een roosteropdeling met drie subdomeinen die ervoor zorgt dat er tussen twee processoren communicatie nodig is, een andere roosteropdeling waarbij juist geen communicatie nodig is.

Tenslotte moeten een een of enkele testmodellen geschikt worden gemaakt voor de testbank van WAQUA/TRIWAQ.

Hoofdstuk 4

Formuleringen voor temperatuur

4.1 Opname van de testversie van Alkyon

De werkzaamheden van Alkyon ten behoeve van het Noordzeekanaal worden beschreven in [2]. De uitgangsversie voor de werkzaamheden van Alkyon is SIMONA exportversie 2005-01 (voorjaar 2005).

De gewenste aanpassingen voor opname van het temperatuurmodel in TRIWAQ zijn beschreven in [6, par.3.3]. Volgens [2] zijn de volgende aanpassingen gemaakt aan WAQPRO:

- **trsdif**: extra argumenten toegevoegd: `ltemp`, `ktemp`, `fclou`, `dwat`, `zwnd(7)`, `sarea` en `cp`;
- **trsdif**: extra berekening toegevoegd: aanroep van subroutine `washtu` en verwerking van het resultaat (`heatex`) in `gsour` en `gsink`;
- **wastru/v**: activeren, vullen en doorgeven van inputs voor het temperatuurmodel aan `trsdif`;
- **washtu**: doorgeven van enkel de temperatuur in een roosterpunt (`rp(nm,ltemp)`) in plaats van het hele array `rp`;
- **wasdfc**: aanpassing in de “special source term” (temperatuur) rond regel 1079: toevoeging van oppervlak `gsqs(nm)` van de roostercel;
- **wastgd**: opvragen van variabele `ltemp` uit `intgda`, aanmaken van arrays `gsour` en `gsink` bij gebruik van het temperatuurmodel;
- **wasco**: kleine correctie `name` → `name1`.

In WAQPRE hoefde alleen het temperatuurmodel te worden toestaan; het werd afgevangen met warning 2529 “temperature model not available in current version of WAQUA” (subroutine `wap002`).

Het temperatuurmodel levert een bijdrage aan de transportvergelijking voor getransporteerde stof (constituent) nummer `ltemp`. In TRIWAQ is er alleen een bijdrage in de bovenste laag

(`kmax=1`) (uitwisseling met de atmosfeer). De bijdrage wordt berekend voor alle roosterpunten van het horizontale vlak. Hiervoor wordt subroutine `washtu` aangeroepen per roosterpunt.

Voor het verwerken van de bijdragen wordt het mechanisme van “global source terms” gebruikt: arrays `gsour` en `gsink`. Het is beter om dit te vervangen door een apart mechanisme. Op de huidige manier moet er namelijk scherp worden opgelet wanneer er meerdere stoffen tegelijk worden gesimuleerd, en kan het temperatuurmodel niet met gebruik van de user-transportroutine worden gecombineerd. Er kunnen beter aparte werkarrays voor het temperatuurmodel worden gebruikt, of de resulterende term moet direct in het stelsel (coëfficiënten `b1` en `d1`) worden verwerkt. Op het expliciet of impliciet verwerken van de term gaan we verder in in paragraaf 4.3.

Het per roosterpunt apart aanroepen van subroutine `washtu` leidt tot een groot aantal subroutine-calls, en daarmee tot enige performance-overhead. Verder wordt een aantal scalaire invoergrootheden voor de meteo-invoer in dit project vervangen door ruimtelijk variabele invoer (arrays). De loop over alle roosterpunten kan dan goed in subroutine `washtu` worden verwerkt.

4.2 Opname van de projectversie van NOMADS2

De projectversie TRIWAQ/TEM is in 2000 gerealiseerd in het kader van het project NOMADS2. Ten behoeve van dit project zijn de volgende bestanden aangeleverd:

- bestanden van WAQPRE: `wap002.f` en `waqpre.f`. Hierin zijn vergelijkbare aanpassingen gemaakt als door Alkyon is gedaan voor het Noordzeekanaal;
- bestanden van WAQPRO: subroutines `trsdif`, `trshea`, `trstmp`, `trsviz`, `washtu`, `wassfc`, `wassim`, `wastru`, `wastrv`, hoofdprogramma `waqpro.f`;
- verschillen tussen de routines van WAQPRO en de gebruikte uitgangsversies;
- een subroutine voor WAQGEN: `wagttt.f`;
- een drietal simulatie-invoerfiles voor een gebied van 8×8 roosterpunten met 40 lagen: korte en lange simulaties met verschillende bodemligging en windforcering.

De verschilfiles zijn niet helemaal zuiver, maar bevatten ook regels die waarschijnlijk niet in het project maar in de moederversie zijn aangepast. De verschilfiles lijken te zijn aangemaakt met de laatste sequentiële versie van TRIWAQ die is uitgegeven in juni 2006.

De aanpassingen ten behoeve van de implementatie van het temperatuurmodel zijn als volgt:

- `trsdif`: de dimensie `lmax` is weggehaald uit arrays `gsour` en `gsink`;
- `trsdif`: de global source en sinkterms worden alleen toegevoegd wanneer `1.eq.ltemp`;
- `wassfc`: omrekenen van datum naar dagnummer toegevoegd (`intgda(177,2)`);
- `wassim`: extra argument `nst` toegevoegd in calls van `wastru/v`;

- **wastru/v**: ophalen/activeren van extra arrays, t.w. **windu/v**, **pres**, bepalen dagnummer, bepalen latitude;
- **wastru/v**: aanroepen **trshea**, heat flux model;
- **wastru/v**: aanroepen **trstmp**, berekenen transport van temperatuur;
- **wastru/v**: aanroepen **trsdif**, berekenen overige constituents 1..lmax-1;
- **trshea**: nieuwe routine voor het berekenen van de heat-flux aan het wateroppervlak volgens het model van Proctor;
- **trstmp**: nieuwe routine voor berekenen van transportvergelijking voor temperatuur. Afgeleid van **trsdif**, maar zonder horizontale advection en diffusie, zonder artificial creep, bodemwrijving, etc.;

Het bestand **trshea** bevat drie subroutines: subroutine **trshea** zelf en onderliggende routines **heatls** en **solrad**. De onderliggende routines worden echter niet meer gebruikt, maar zijn verwerkt (ge-inlined) in subroutine **trshea** zelf. De berekeningen van subroutine **trshea** zijn 180 code-regels lang.

De berekeningen in subroutine **trshea** is met een vertaaltabel van symbolen naar variabele-namen te herleiden naar de formules in [6]:

heatex - totale warmteflux, ΔH ;

q1 - hulpvariabele voor heat-losses;

h1 - temperatuurstraling van water, H_{brad} ;

ske - warmteverlies door verdamping, H_{evap} ;

sk - warmteverlies door convectie, H_{conv} ;

Een klein verschil tussen [6] en **trshea** is dat in **trshea** in H_{conv} de dichtheid van droge lucht ρ_{dry} gebruikt wordt in plaats van de algemene dichtheid. Verder wordt voor E_{top} de waarde $1368 W/m^2$ in plaats van $1365 W/m^2$ gebruikt, en is de emissiviteit van water in de temperatuurstraling $\epsilon = 0.985$ in plaats van 0.97. Ook komt de formule voor de specifieke vochtigheid ($q_{a,s}$) niet precies overeen.

Een aandachtspunt is dat de bewolgingsgraad en vochtigheidsgraad niet in fracties maar in procenten zijn gedefiniëerd. Een ander aandachtspunt is dat de tijd t die in de instralingsformule wordt gebruikt ten opzichte van de lokale tijdzone lijkt te zijn gedefiniëerd. De lengtegraad van een roosterpunt ten opzichte van de oorsprong wordt in het model niet gebruikt.

4.3 Impliciet maken van temperatuur-sinks in WAQUA

In WAQUA en TRIWAQ hebben we te maken met lokale en globale lozingen en innames. In TRIWAQ worden lozingen altijd expliciet (in het rechterlid `d1`) en innames impliciet (in het linkerlid `b1`) verwerkt. In WAQUA wordt hetzelfde gedaan, behalve voor de (globale) warmteflux aan het oppervlak. Deze wordt altijd expliciet verwerkt, ongeacht of de bijdrage positief of negatief is. Verder wordt de inname van lokale sinks anders verwerkt wanneer de getransporteerde stof temperatuur is *en* het om de inlaat van een powerstation gaat. Deze inname wordt expliciet verwerkt, zie ook paragraaf 3.4.

In de warmtemodule `trshea` die in de speciale TRIWAQ/TEM versie is toegevoegd wordt de heatflux in de arrays `gsour` en `gsink` voor globale lozingen geladen. De keuze van de source- of sinkterm hangt af van het teken. Een positieve flux (warmtetoevoer) is een source-term en verdwijnt in het rechterlid `d1` aan de rechterkant van het lineaire stelsel. Een negatieve flux (warmteverlies) is een sink-term en verdwijnt in de diagonaal `b1` van de matrix van het lineaire stelsel. Bovendien wordt hier geschaald met de watertemperatuur van het vorige tijdstip.

Expliciete verwerking van de heat-flux kan als volgt worden geschreven:

$$V'c' = Vc + \text{heatex}(c) \quad (4.1)$$

Hierin zijn V' en V de volumes van een roostercel op het nieuwe (V') en oude tijdstip. De variabelen c' en c zijn de nieuwe en oude concentraties opgeloste stof (temperatuur). De transporttermen (advectie, diffusie) en lokale bronnen zijn weggelaten. Deze worden deels expliciet en deels impliciet verwerkt via een ADI-schema.

Volledig impliciete verwerking zou vergen dat de volgende vergelijking wordt opgelost:

$$V'c' - \text{heatex}(c') = Vc \quad (4.2)$$

Dit zou een stabiel stelsel moeten opleveren. Vanwege de sterke niet-lineariteiten is het oplossen van deze vergelijking echter niet praktisch. Daarom zou de volgende linearisatie kunnen worden gebruikt:

$$V'c' = Vc + \text{heatex}(c) + (c' - c) \cdot \text{dheat}(c) \quad (4.3)$$

In de praktijk zijn er echter een hoop onzekerheden in het temperatuurmodel. De gebruikte formuleringen zijn onzeker, de parameters hierin, maar bovenal ook de meteo-invoer zoals bewolingsgraad en luchtvochtigheidsgraad. Daarom wordt er in TRIWAQ/TEM voor een eenvoudige methode gebruikt. Deze introduceert een bescheiden linearisatiefout, maar verbetert wel de stabiliteit zonder dat daarvoor een complexe formule hoeft te worden geïmplementeerd:

$$V'c' = Vc + \text{heatex}(c) + (c' - c) \cdot \frac{\text{heatex}(c)}{c} \quad (4.4)$$

Deze wordt geïmplementeerd via:

$$\left(V' - \frac{\text{heatex}(c)}{c} \right) c' = Vc \quad (4.5)$$

Belangrijk bij deze formule is wel dat $\text{heatex}(c)$ negatief is, waardoor de coëfficiënt voor c' in het stelsel groter wordt gemaakt, anders levert de aanpassing geen stabilisatie op.

Deze aanpak zou ook voor bij de berekening van temperatuur in WAQUA moeten worden gebruikt.

4.4 Ontwerp solvermodules

In de vorige paragrafen zijn verschillende aspecten van het temperatuurmodel aan de orde geweest. Daarbij zijn er ook meerdere varianten voor hetzelfde aspect besproken. In deze paragraaf maken we keuzes ten aanzien van de mogelijke voorstellen en geven we het ontwerp voor de opname van het temperatuurmodel in het rekenhart van WAQUA/TRIWAQ.

Een eerste keuze die we voorstellen is:

- De aanroep van het temperatuurmodel wordt uit de transportroutines `trsdif` en `wasdfc` gehaald en verhuisd naar de koproutines `wastru` en `wastrv`.

Dit is de strategie die in de implementatie van het POL-model, de versie TRIWAQ/TEM, is gebruikt. We vinden deze aanpak eleganter omdat de formuleringen voor temperatuur feitelijk losstaan van de transportvergelijking zelf. Het zijn een soort randvoorwaarden die net als de overige randvoorwaarden apart van de rekenkern kunnen worden geïmplementeerd. Verder voorkomen we hiermee dat er allerlei argumenten voor het temperatuurmodel moeten worden doorgegeven aan `trsdif` en `wasdfc`.

In het verlengde van deze keuze stellen we de volgende aanpassingen voor:

- Subroutine `washtu` gaat in een keer de berekeningen voor het temperatuurmodel voor alle roosterpunten uitvoeren, in plaats van te worden aangeroepen per roosterpunt apart;
- Het resultaat van het temperatuurmodel is een bronterm voor het transport van temperatuur. Deze wordt opgeslagen in een nieuw (tijdelijk) array `heatex(nmax, -2:mmax+3)`. Dit betreft (vooralsnog) alleen de bovenste laag `k=1` van het model;
- De waarden in `heatex` worden reeds door `washtu` omgerekend naar temperatuurveranderingen. Ze zijn de warmteflux gedeeld door `cp*rhow`;
- De rekenroutines bepalen hoe de bronterm uit `heatex` wordt verwerkt: positieve waarden (netto opwarming van het water) worden in het rechterlid `dl` gezet, negatieve waarden (afkoeling) in het linkerlid `bl`. In het laatste geval wordt de bronterm gedeeld door de temperatuur op het oude tijdsniveau ($\max(10^{-5}, c_{mn1})$);
- De arrays `gsour` en `gsink` worden niet gebruikt voor het temperatuurmodel;
- De (in de initialisatiefase bepaalde) latitude per roosterpunt wordt doorgegeven aan subroutine `washtu`, waar de formule voor zonnestraling wordt toegevoegd. Een aandachtspunt hierbij is het gebruikte tijdstip, waarin voor grootschalige modellen eigenlijk ook de lengtegraad zou moeten worden verdisconteerd;
- De actuele (mogelijk ruimtelijk variabele) meteo-invoer wordt bepaald bij de forcings voor het transportmodel (subroutine `wasstf`) of bij het verwerken van de ruimtelijk variabele windgegevens (SVWP) in subroutine `wasvwp`;

Voor subroutine `washtu` stellen we de volgende aanpassingen voor:

- Veel meer annoteren van de bestaande code. Bijvoorbeeld toevoegen dat “model 3” de formulerling van Sweers betreft, dat dit een “heat-exchange module” op basis van excess temperatuur is, en vervangen van “qsn: intermediate term” door “qsn: contribution of solar radiation”;
- omzetten van een functie naar een subroutine, toevoegen van een loop over alle roosterpunten, en van het uitvoerarray `heatex` in plaats van returnwaarde `washtu`;
- vervangen van scalaire meteo-parameters door arrays;
- toevoegen van de formulering van Lane (POL) als optie `ktemp=4`, inclusief extra uitleg/annotatie bij deze formulering.

Er is geen uitgebreide aandacht nodig voor het gebruik van het temperatuurmodel in combinatie met parallel rekenen en/of domein decompositie. Het warmtemodel zelf is lokaal per roosterpunt, het gebruikt geen informatie van naastgelegen roosterpunten. De enige twee vereisten voor parallelisatie zijn dan het uitvoeren van de loop in `washtu` voor de goede roosterpunten (alleen van het eigen subdomein), en het zorgen dat alle invoerparameters beschikbaar zijn (partitioneren van meteo-gegevens in COPPRE). Hieraan wordt gemakkelijk voldaan zolang er slechts een enkele meteo SDS-file wordt gebruikt en zolang die SDS-file slechts een enkel rooster bevat.

Het temperatuurmodel zou ook zonder wijzigingen in combinatie met domein decompositie met proceskoppeling moeten kunnen worden gebruikt. De implementatie en testen hiervan zijn in het huidige ontwerp echter nog niet meegenomen. Met name moeten er aanpassingen aan de controles voor domein decompositie in COEXEC worden gemaakt en moet er een testmodel worden opgesteld.

Voor het gebruik van het nieuwe temperatuurmodel in combinatie met Kalman-filtering lijken vooral de nieuwe forcings aan het Kalman filter te moeten worden toegevoegd: opslaan van de forcings, en terugzetten bij de berekening van error modes. Er lijken geen nieuwe statevariabelen te worden geïntroduceerd. De implementatie en testen van deze uitbreiding van het Kalman-filter is in dit rapport verder niet voorzien.

Dit ontwerp is zijdelings gerelateerd aan het project “uniformering van WAQUA en TRIWAQ” dat momenteel wordt uitgevoerd. In dat project worden de rekenkernen van WAQUA en TRIWAQ samengevoegd tot een enkel nieuw rekenhart. Dat vergemakkelijkt de implementatie van het temperatuurmodel, omdat er geen dubbel werk voor WAQUA en TRIWAQ hoeft te worden gedaan. Daar wordt rekening mee gehouden in de tijdschatting die in het volgende hoofdstuk gegeven wordt.

4.5 Aanpassingen technische documentatie

De algemene formuleringen met betrekking tot temperatuur kunnen goed worden toegevoegd als paragraaf 2.5 in [7]. Hierbij kunnen paragrafen 2.3 en 2.4 uit [6] worden overgenomen en naar het Engels worden vertaald. De figuren uit [6] met vergelijking van de verschillende formuleringen hoeven niet te worden overgenomen.

De aanpak voor verwerken van de warmteflux in de transportvergelijking kan worden beschreven in een nieuwe subsectie 4.5.6 bij de discretisatie van de transportvergelijking.

De aanwezigheid van verschillende temperatuurmodellen zal ook worden opgenomen in het algemene gedeelte van de users guide WAQUA [4]: in paragraaf 3.4.2.7 (equation of state) en in paragraaf 3.8 (transport of constituents).

4.6 Beoogde testen temperatuurmodel

Een eerste set testen die kan worden uitgevoerd is bepalen of de nieuwe versie hetzelfde doet als de huidige moederversie van de programmatuur. Dit zijn testen met constante meteo-invoer die wordt opgegeven via het mechanisme voor in ruimte en/of tijd variërende meteo-invoer, met WAQUA, met de bestaande formuleringen voor temperatuur.

Ook kunnen er sommen worden vergeleken met de projectversie van Alkyon. Hierin zitten de formuleringen ook in TRIWAQ geïmplementeerd en worden onttrekkingen impliciet behandeld.

In eenvoudige gevallen kunnen de fluxen aan het oppervlak met de hand (of Excel) worden nagerekend, en kan hiermee de implementatie van het totale temperatuurmodel worden gevalideerd.

Vervolgens moet de nieuwe functionaliteit worden getest:

- Ruimtelijk en temporeel variërende meteo-invoer;
- Het temperatuurmodel van POL/Lane.

Voor deze twee gevallen is het moeilijk om te beoordelen of het resultaat van de nieuwe WAQUA/TRIWAQ versie “goed” is. De meest praktische methode hiervoor lijkt te zijn om een vergelijking te maken met sommen die met Delft3D zijn uitgevoerd. Alternatieven zijn om in de literatuur naar een geschikte test-case te zoeken of te kijken of bepaalde berekeningen uit NOMADS-2 kunnen worden gereproduceerd.

Tenslotte moeten verschillende testmodellen geschikt worden gemaakt voor de testbank van WAQUA/TRIWAQ (snel uitvoerbaar, weinig gevoelig voor kleine verstoringen).

Hoofdstuk 5

Plan van aanpak en tijdschatting

De hiervoor beschreven aanpassingen bestaan uit een heleboel min of meer opzichzelfstaande activiteiten. Bij de implementatie is het handig om eerst de gewenste herstructurering aan WAQPRO door te voeren (paragraaf 4.4, met uitzondering van de meteo-invoer). Vervolgens kunnen de aanpassingen voor de meteo-invoer en de powerstations grotendeels onafhankelijk van elkaar worden gedaan.

Er kunnen fases en deelprodukten worden gedefinieerd, maar dat lijkt ons niet heel belangrijk. Het project als geheel is goed te overzien, en alle fases zijn al in een redelijke mate van detail uitgewerkt. Verder zijn ze allemaal nodig in het eindresultaat.

De implementatiewerkzaamheden kunnen volledig door VORtech of door VORtech en Alkyon samen worden uitgevoerd. Het laatste kan voordelig zijn voor de doorlooptijd. In dat geval kan Alkyon vooral goed de werkzaamheden aan WAQWND voor haar rekening nemen. Het testen kan goed door Alkyon worden gedaan.

1. Aanpassen formuleringen temperatuurmodel

- Annotatie van de berekeningen in `washtu`;
- In `washtu` uitvoeren van een loop over alle punten in plaats van aanroep per roosterpunt apart;
- Verhuizen van `washtu` naar koproutines `wastru/v`;
- Impliciet/expliciet verwerken van de warmteflux in `wasdfc`;
- Toevoegen van temperatuurmodel in TRIWAQ (`trsdif`);
- Toevoegen temperatuurmodel van Lane89 aan subroutine `washtu`.

2. Herzien van de berekeningen ten aanzien van zonnestraling

- Berekenen van de latitude per roosterpunt in de initialisatiefase in WAQPRO;
- Berekenen van de zonneinstraling als functie van plaats en tijd in `washtu`.

3. Herzien/uitbreiden van gebruikersinvoer van WAQPRE

- toevoegen keyword GENERAL - METEO_DATA en onderliggende keywords;

- toevoegen keyword TEMPERATURE en wijzigen TRANSPORT;
 - aanmaken van nieuwe arrays op de SDS-file, inclusief hergebruik bestaande arrays voor tijdseries;
 - inlezen van nieuwe keywords, opslaan van data op de SDS-file;
 - Aanpassen LDS-documentatie, `dlds`-bestand, `coplds.waqua`;
 - Aanpassen/uitbreiden gebruikersdocumentatie WAQPRE.
4. Afhandeling van meteo-gegevens in WAQWND
- Verkrijgen invoer-files voor WAQWND;
 - Uitbreiden WAQWND en meteo SDS-file;
 - Aanpassen LDS-documentatie, `dlds`-bestand, `coplds.swwp`;
 - Uitbreiden gebruikersdocumentatie WAQWND.
5. Invoering tijdseries en ruimtelijke data in WAQPRO
- invoeren arrays i.p.v. scalaire grootheden voor meteo-parameters in `washtu`;
 - vullen meteo-arrays bij transport-forcings in `wasstf`;
 - toevoegen van interpolaties (`siintp`) voor ruimtelijk variabele meteo invoer in `wasstf`;
6. Invoering van powerstations in WAQPRE
- Uitbreiden gebruikersinvoer, afhandeling in WAQPRE, toevoegen grootheden op SDS-file;
 - Aanpassen LDS-documentatie, `dlds`-bestand, `coplds.waqua`;
 - Uitbreiden gebruikersdocumentatie WAQPRE.
7. Invoering powerstations in WAQPRO
- Toevoeging strategie van paragraaf 3.5 voor afhandeling powerstations in parallelle runs;
 - Testen in sequentiële en parallelle runs;
 - Aanpassing detail ontwerp parallellisatie-aspecten WAQUA/TRIWAQ.
8. Testen, afronden en oplevering
- Netjes afronden van alle produkten (code en documentatie);
 - Regressietesten met de testbank;
 - Testen van de nieuwe functionaliteit en schrijven van een testverslag.

Onze tijdschatting voor deze werkzaamheden wordt gegeven in Tabel 5.1.

Merk op dat in deze tijdschatting is uitgegaan van het ontwerp en de afbakening zoals hiervoor zijn gepresenteerd. Een aantal specifieke aandachtspunten die zijn genoemd in dit rapport en die niet zijn meegenomen in de schatting zijn:

1. Aanpassen formuleringen temperatuurmodel	9 dagen
2. Herzien van de berekeningen ten aanzien van zonnestraling	3 dagen
3. Herzien/uitbreiden van gebruikersinvoer van WAQPRE	6 dagen
4. Afhandeling van meteo-gegevens in WAQWND	5 dagen
5. Invoering tijdseries en ruimtelijke data in WAQPRO	3 dagen
6. Invoering van powerstations in WAQPRE	3 dagen
7. Invoering powerstations in WAQPRO	4 dagen
8. Testen nieuwe functionaliteit	9 dagen
Projectleiding en onvoorzien 15%	7 dagen
TOTAAL	49 dagen

Tabel 5.1: *Tijdschatting voor de beschreven uitbreiding van de temperatuurmodellering in WAQUA/TRIWAQ.*

- Voor het kunnen inspecteren van de nieuwe meteo-gegevens moeten er kleine aanpassingen worden gemaakt aan `getdata` en `waqview` (paragraaf 2.2.4).
- WAQWND zou ook flink kunnen worden verbeterd op basis van een nette keyword-gestuurde invoerfile (paragraaf 2.2.5).
- De aanpassingen van de WAQUA simulatie-invoerfile zouden ook moeten worden verwerkt in een nieuwe versie van IPW (paragraaf 2.3.5).
- Bij powerstations zal alleen de expliciete methode worden geïmplementeerd en worden gekeken of er hiermee (ernstige) stabiliteitsproblemen optreden (paragraaf 3.4).
- Alhoewel het nieuwe temperatuurmodel direct zou moeten kunnen worden gecombineerd met domein decompositie met proceskoppeling zal dit niet worden getest (paragraaf 4.4).
- Het temperatuurmodel zal nog niet kunnen worden gebruikt in combinatie met Kalman filtering (paragraaf 4.4).

Referenties

- [1] E.D. de Goede, J.N. Roozekrans, J.M. de Kok, R.J. Vos, and R.E. Uittenboogaard. REST3D: Remote sensing sea surface temperature for 3D North Sea modeling. Technical Report NRSP-2 00-16, BCRS, 2000.
- [2] G. Hartsuiker. Kalibratie en 3D simulaties Noordzeekanaal model met temperatuur en saliniteit. Technical Report A1564R2, Alkyon, 2006.
- [3] A. Lane. The heat-balance of the North Sea. Technical Report no. 8, Proudman Oceanographic Laboratory, 1989.
- [4] Rijkswaterstaat/RIKZ. Users guide WAQUA. Technical Report SIMONA 92-10, National Institute for Coastal and Marine Management, the Hague, the Netherlands, 2001.
- [5] E.A.H. Vollebregt, M.R.T. Roest, and B. van 't Hof. Detailontwerp van de domein decompositie in WAQUA en TRIWAQ. Technical Report TR01-06 (versie 2.2), VORtech, Postbus 260, 2600 AG Delft, November 2004. In opdracht van RIKZ.
- [6] R.J. Vos. Modelling van koelwaterlozingen en watertemperatuur met TRIWAQ. Technical Report RIKZ/KW/2005.117W, Rijkswaterstaat/RIKZ, 2005.
- [7] M. Zijlema. Technical documentation TRIWAQ. Technical Report SIMONA 99-01, National Institute for Coastal and Marine Management, the Hague, the Netherlands, 1999.