

ORPHEUS 2.0



Vernieuwd instrument voor de bepaling van
stoftransport uit baggerspeciedepots:
Oppervlaktewaterkwaliteit
Grondwaterkwaliteit

96-13

Publikaties en het publikatieoverzicht
van de Stowa kunt u uitsluitend
bestellen bij:
Hageman Verpakkers BV
Postbus 281
2700 AC Zoetermeer
tel. 079-3611188
fax 079-3613927
o.v.v. ISBN- of bestelnummer en
een duidelijk afleveradres.
ISBN nr. 90.74476.52.X
Bijbehorende software kan
besteld worden bij:
Waterloopkundig Laboratorium
Postbus 177
2600 MH Delft
tel. 015-2569353
fax 015-2619674
o.v.v. 'software ORPHEUS 2.0'

Inhoud

Ten geleide	iii
1 ORPHEUS 2.0	1 – 1
1.1 ORPHEUS	1 – 1
1.2 ORPHEUS 2.0	1 – 2
1.3 Opbouw ORPHEUS 2.0	1 – 3
1.4 Toepassing van ORPHEUS 2.0	1 – 7
2 Voor u begint	2 – 1
2.1 ORPHEUS 2.0 systeemdocumentatie	2 – 1
2.2 Typografische conventies	2 – 2
2.2.1 Algemene conventies	2 – 2
2.2.2 Toetsenbordconventies	2 – 3
2.2.3 Muisconventies	2 – 3
2.3 ORPHEUS 2.0 Help Desk	2 – 4
2.4 Installatie van ORPHEUS 2.0	2 – 5
2.4.1 Kopiëren van de diskettes	2 – 5
2.4.2 Minimum systeemeisen	2 – 5
2.4.3 De installatieprocedure voor ORPHEUS 2.0	2 – 6
3 Beginnen met het gebruik van ORPHEUS 2.0	3 – 1
3.1 Inleiding	3 – 1
3.2 Draai oppervlaktewatermodellen	3 – 3
3.3 Draai grondwatermodellen	3 – 5
3.3.1 Beschrijving geohydrologische model	3 – 5
3.3.2 Rekenen met het grondwatermodel	3 – 7
3.4 Beheer scenario's	3 – 24

4	Hulpmiddelen uit Delft DSS	4 – 1
4.1	Delft DSS systeem diagram	4 – 1
4.2	Het schilprogramma WL_SHELL.EXE	4 – 2
4.2.1	Werken met de schermobjecten van WL_SHELL	4 – 4
4.3	De algemene model invoer editor MIE.EXE	4 – 5
4.4	Case Management Tool CMT	4 – 5
4.4.1	Introductie	4 – 5
4.4.2	Werken met de schermobjecten van het CMT	4 – 7
4.4.3	Menu-opties in het case management tool programma ...	4 – 8
5	Opbouw systeem	5 – 1
5.1	Overzicht	5 – 1
5.2	Oppervlaktewatermodel	5 – 1
5.3	Grondwatermodel	5 – 2
5.3.1	MODGRID pre/post	5 – 2
5.3.2	MODFLOW	5 – 3
5.3.3	STYXZG	5 – 3
5.3.4	STYXZ	5 – 4
5.3.5	STYXZMAP	5 – 5
5.3.6	STYXZP	5 – 5
5.4	Fileoverzicht	5 – 6
5.4.1	Fileoverzicht oppervlaktewatermodel	5 – 6
5.4.2	Fileoverzicht grondwatermodel	5 – 7

6	Gebruik systeem	6 - 1
6.1	Beschikbare handleidingen	6 - 1
6.2	Gebruik CMT menuschil	6 - 2
6.3	Gebruik oppervlaktewatermodel	6 - 6
6.4	Gebruik grondwatermodel	6 - 8
6.4.1	Modeltechniek	6 - 8
6.4.2	Aanmaak invoer MODFLOW	6 - 11
6.4.3	Rekenen met MODFLOW	6 - 13
6.4.4	Rekenen met STYXZG	6 - 15
6.4.5	Rekenen met STYXZ	6 - 17
6.4.6	Resultaten tonen	6 - 19
6.4.7	Getalsmatige analyse met STYXZP	6 - 19
6.5	Bijzondere zaken	6 - 20

BIJLAGEN:

Bijlage A Generieke hulpmiddelen:

- Bijlage A1 Begrippenlijst
- Bijlage A2 Beslissings Ondersteunend Systeem (BOS)
- Bijlage A3 Shell programs
- Bijlage A4 Case Management Tool

Bijlage B Simulatiemodellen:

- Bijlage B1 MODGRID
- Bijlage B2 STYXZ

Ten geleide

In Nederland sedimenteert jaarlijks een aanzienlijke hoeveelheid baggerspecie. Dit materiaal bevat vaak aanzienlijke gehalten aan zware metalen, organische microverontreinigingen en/of nutriënten. De specie wordt door de waterbeheerders (o.a. Rijkswaterstaat en de Waterschappen) in het kader van onderhouds- of saneringsbaggerwerkzaamheden verwijderd. Indien de verontreinigingsgraad van de vrijgekomen specie te hoog is, moet conform het Beleidsstandpunt Verwijdering Baggerspecie de specie toegepast of gestort worden. Als baggerspecie gestort wordt, zal dit in het algemeen plaatsvinden in diepe putten die in het verleden bij zandwinning zijn ontstaan, of in speciaal voor dit doel geconstrueerde baggerspeciedepots. Een dergelijke opslag zal effecten hebben op de kwaliteit van het oppervlaktewater en het grondwater. Deze effecten moeten vaak voor de vergunningverlening in het kader van de Wet Milieubeheer en de Wet Verontreiniging Oppervlaktewater gekwantificeerd worden.

Voor het onderzoek naar de effecten van het storten van baggerspecie zijn computermodellen noodzakelijk. Daarom is in de tweede helft van de jaren tachtig door een aantal waterbeheerders en provincies in het westen en noorden van het land, alsmede de toenmalige Dienst Binnenwateren/RIZA en de STORA opdracht verleend aan het Waterloopkundig Laboratorium tot de ontwikkeling van een screenings-instrumentarium voor onderzoek naar de gevolgen van baggerstorten in diepe zandwinputten, dat de beheerders zelf in staat stelt om onderzoek uit te voeren op dit gebied. Dit heeft geresulteerd in het opleveren in 1989 van het ORPHEUS-instrument (Onderzoeksinstrument naar de Regionale Potentiële Hydrogeochemische Effecten door Uitwisseling met Slib).

ORPHEUS is in een groot aantal studies toegepast voor het bepalen van de effecten van de berging van baggerspecie. Gaandeweg is de behoefte ontstaan aan het verder ontwikkelen en het moderniseren van ORPHEUS. Teneinde de behoefte hieromtrent te peilen heeft STOWA een enquête gehouden onder de potentieel belanghebbende waterbeheerders, aangevuld met RIZA en de Dienst Weg- en Waterbouw van Rijkswaterstaat. Hoewel de reacties op de enquête zeer uiteenliepen qua omvang en inhoud zijn ze globaal als volgt samen te vatten:

- De waterbeheerders zullen over het algemeen in de toekomst ORPHEUS niet meer zelf gebruiken, maar werk waarin de toepassing van ORPHEUS aan de orde is uitbesteden;
- De redesign van ORPHEUS is desalniettemin wenselijk met het oog op milieu-effectstudies met betrekking tot baggerspeciedepots;
- De redesign dient zich te concentreren op de grondwatermodules en een simpele doch effectieve user-interface.

Er bleek dus behoefte te bestaan aan een nieuwe versie van ORPHEUS, waarin de modernste grondwatermodellen waren opgenomen en die beter toegankelijk was voor de betrokkene onervaren gebruiker. Dit heeft uiteindelijk geleid tot opdrachtverlening door STOWA in 1994 voor het project "Redesign ORPHEUS". Parallel aan deze opdracht is door RIZA opdracht verleend voor een verdere inhoudelijke verdieping van het transportprogramma STYXZ, dat in ORPHEUS is opgenomen. Voorts is door zowel RIZA als STOWA aangegeven, dat er veel belangstelling is voor het breed toepasbaar maken van ORPHEUS, zodat het ook geschikt wordt voor studie van de verspreiding vanuit de waterbodem en depots op land. ORPHEUS zal daarmee een rol kunnen vervullen bij het vaststellen van saneringsurgentie- en prioriteiten enerzijds en bij de afweging van uiteenlopende bergingsopties anderzijds.

Het project "Redesign ORPHEUS" heeft geleid tot "ORPHEUS 2.0". ORPHEUS 2.0 is een gemakkelijk inzetbaar onderzoeksinstrument, dat is samengesteld uit een aantal computerprogramma's die met behulp van een moderne user-interface bediend kunnen worden. ORPHEUS 2.0 biedt alle functionaliteiten die nodig zijn bij het beantwoorden van de huidige vraagstelling ten aanzien van oppervlaktewater- en grondwaterkwaliteit met betrekking tot baggerspecie- en baggerspeciedepots. De begeleidingscommissie is dan ook van mening dat dit instrument geschikt is voor de beoordeling van de milieu-effecten van de berging van baggerspecie.

Het onderzoek is uitgevoerd door medewerkers van het Waterloopkundig Laboratorium te Delft door ir. P.S. Grashoff (projectleider), drs. N.M. de Rooij, ir. H.J. Gerrits en drs. W. van Ellen. Het project werd begeleid door een commissie bestaande uit dr.ir. J.V. Witter (Hoogheemraadschap West-Brabant) als voorzitter, drs. J.C.A. van Alphen (Zuiveringsschap Amstel- en Gooiland), ing. O. Frankena (Hoogheemraadschap van Uitwaterende Sluizen in Hollands Noorderkwartier), ing. E. de Groot (Hoogheemraadschap van Rijnland), dr. S.P. Klapwijk (STOWA), ing. K.J. Otten (Grontmij), dhr. J.M. van Steenwijk (RIZA), ir. B.W. Thorborg (Dienst Weg en Waterbouw RWS) en ing. V. Schaap (Rijkswaterstaat, directie Noord-Holland).

Utrecht, januari 1996

De directeur van de STOWA

drs. J.F. Noorthoorn van der Kruijff

1 ORPHEUS 2.0

Vernieuwd instrument voor de bepaling van stoftransport uit baggerspeciedepots

1.1 ORPHEUS

In Nederland sedimenteert jaarlijks een aanzienlijke hoeveelheid baggerspecie. Dit materiaal bevat vaak behoorlijke gehalten aan zware metalen, organische microverontreinigingen en/of nutriënten. De specie wordt door de waterbeheerders (o.a. Rijkswaterstaat en de Waterschappen) in het kader van onderhouds- of saneringsbaggerwerkzaamheden verwijderd. Indien de verontreinigingsgraad van de vrijgekomen specie te hoog is, zal deze conform het Beleidsstandpunt Verwijdering Baggerspecie, gereinigd/hergebruikt of gestort moeten worden. Voorsnog zal de specie vooral gestort worden omdat verwerkingsfaciliteiten nog vrijwel niet voorhanden zijn en omdat de verwerking van baggerspecie met hoge kosten gepaard gaat.

Als baggerspecie gestort wordt, zal dit in het algemeen plaatsvinden in diepe putten die in het verleden bij zandwinning zijn ontstaan, of in speciaal voor dit doel geconstrueerde baggerspeciedepots. Een dergelijke opslag zal effecten hebben op de kwaliteit van het oppervlaktewater en het grondwater. Een kwantificering hiervan is vaak noodzakelijk voor de vergunningverlening in het kader van de Wet Milieubeheer en de Wet Verontreiniging Oppervlaktewater.

Voor het onderzoek naar de effecten van het storten van baggerspecie zijn computermodellen noodzakelijk. In 1986 is door een groot aantal waterbeheerders aan WL opdracht verleend tot de ontwikkeling van een set computermodellen (ook wel model-instrument genoemd) waarmee dit onderzoek uitgevoerd zou kunnen worden. De instanties die hierbij betrokken waren zijn:

- Provinciale Waterstaat Noord-Holland (PWS-NH);
- Dienst Binnenwateren/RIZA (DBW/RIZA);
- het Hoogheemraadschap van Rijnland (HHR);
- het Hoogheemraadschap van de Uitwaterende Sluizen in Westfriesland en Kennemerland (US);
- Provincie Friesland (Friesland);
- Provinciale Waterstaat van Utrecht (PWS-U);
- Provinciale Waterstaat van Zuid-Holland (PWS-ZH);
- Stichting Toegepast Onderzoek Reiniging Afvalwater (STORA);
- het Zuiveringschap Amstel- en Gooiland (ZAG).

Het onderzoek dat in het kader van de opdracht is uitgevoerd, heeft in 1989 geleid tot de oplevering van ORPHEUS (Onderzoeksinstrument naar de Regionale Potentiële Hydrogeochemische Effecten door Uitwisseling met Slib). ORPHEUS is een screeningsinstrument waarmee de gevolgen van het storten van baggerspecie in diepe zandwinputten onderzocht kunnen worden. Het bestaat uit een aantal gekoppelde computermodellen die in een gebruikersschil zijn ondergebracht. De opzet van ORPHEUS was zodanig dat het instrument ook door de waterbeheerders zelf gehanteerd zou kunnen worden.

1.2 ORPHEUS 2.0

Het instrument ORPHEUS is bij een groot aantal studies toegepast. Voor het grondwatergedeelte zijn door WL inmiddels echter de veel krachtiger modellen MODFLOW en STYXZ toegevoegd, die beter aansluiten bij de huidige vraagstelling. Bovendien is gebleken dat het instrument bij de waterbeheerders op het ogenblik niet veel meer wordt toegepast omdat voor een correcte bediening ervan een behoorlijke basiskennis noodzakelijk is. Er ontstond dus behoefte aan een nieuwe versie van ORPHEUS, waarin de modernste grondwatermodellen waren opgenomen en dat beter toegankelijk was voor een betrekkelijk onervaren gebruiker.

Om de wensen ten aanzien van een verbeterde versie van ORPHEUS te peilen, heeft de Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer, de STOWA, een enquête gehouden onder de potentieel belanghebbende waterbeheerders, aangevuld met RIZA en de Dienst Weg- en Waterbouw van Rijkswaterstaat. Hoewel de reacties op de enquête zeer uiteenlopen qua omvang en inhoud kunnen ze als volgt samengevat worden:

- De waterbeheerders zullen in het algemeen in de toekomst ORPHEUS niet meer zelf gebruiken, maar zullen het werk waarin de toepassing van ORPHEUS aan de orde is uitbesteden;
- Modernisering van ORPHEUS is desalniettemin wenselijk met het oog op de kwaliteit en efficiëntie van de milieu-effectstudies met betrekking tot baggerspecie;
- De aanpassing van ORPHEUS dient zich te concentreren op de grondwatermodules en een simpele doch effectieve user-interface.

Voorts is door zowel RIZA als STOWA aangegeven, dat er veel belangstelling is voor het breed toepasbaar maken van ORPHEUS, zodat het ook geschikt wordt voor studie van de verspreiding vanuit de waterbodem en depots op land. ORPHEUS zal daarmee een rol kunnen vervullen bij het vaststellen van saneringsurgentie- en prioriteiten enerzijds en bij een afweging van uiteenlopende bergingsopties anderzijds. Deze brede toepasbaarheid is reeds in de in ORPHEUS geïmplementeerde grondwatermodules STYXZ en MODFLOW gerealiseerd voor zover het verzadigde systemen betreft.

Uiteindelijk is aan WL op 30 november 1994 door de STOWA opdracht gegeven voor de aanpassing van ORPHEUS. Dit is het project "Redesign ORPHEUS", dat heeft geleid tot ORPHEUS 2.0. Deze versie van ORPHEUS is bedoeld als een makkelijk inzetbaar onderzoeksinstrument, terwijl de oude versie van ORPHEUS als een screeningsinstrument was bedoeld. Synchroon met de opdracht van de STOWA werd door het RIZA opdracht gegeven een aantal modelformuleringen van STYXZ aan te passen (Gerrits, 1994)¹.

¹ H.J. Gerrits en N.M. de Rooij, 1994; Voorbeeldberekeningen STYXZ 5.00: metabolieten, DOC en redox; Waterloopkundig Laboratorium, Delft

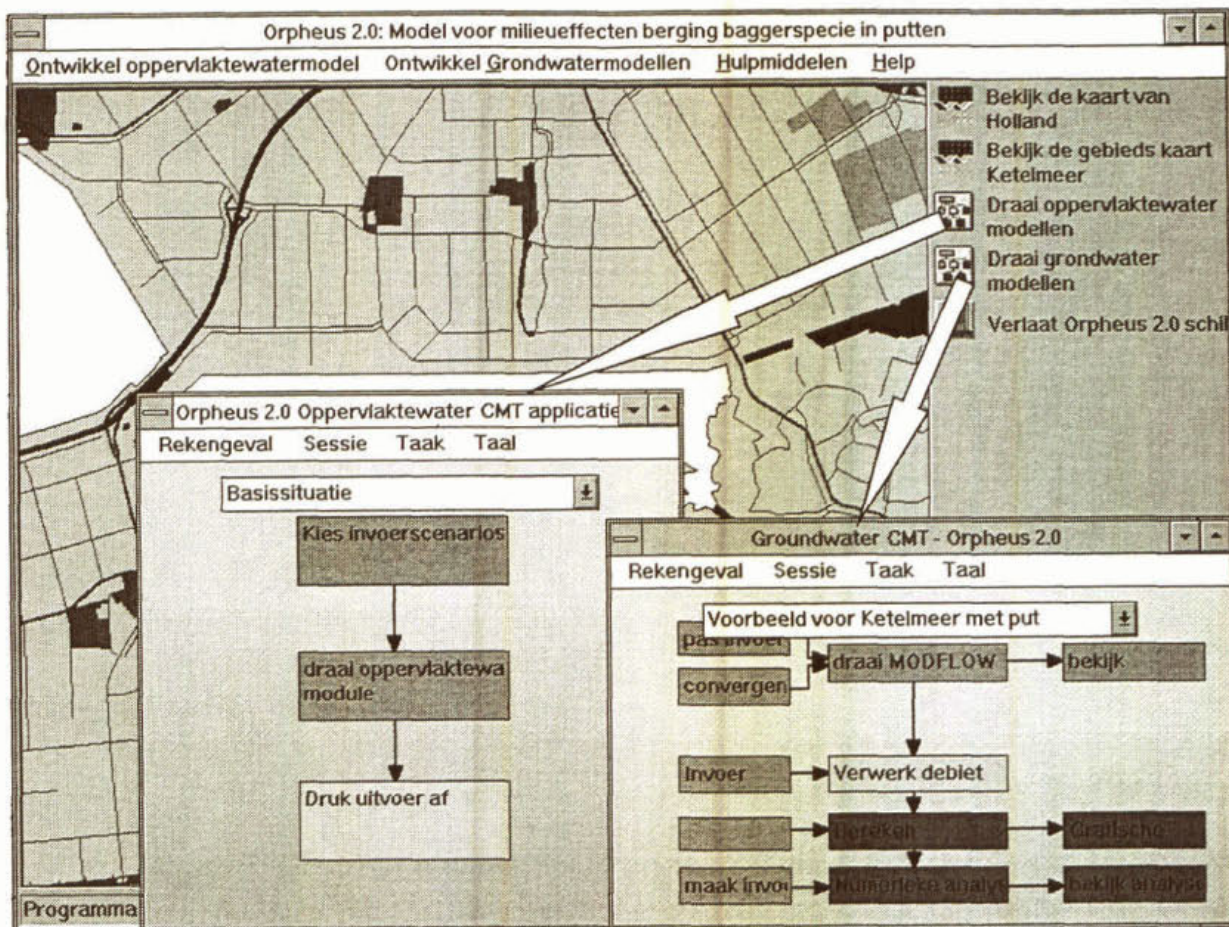
In het kader van het project is het modelinstrumentarium ORPHEUS op de volgende punten gemodificeerd en uitgebreid:

- Het grondwaterkwantiteitsmodel EIGER is door het model MODFLOW vervangen;
- Het stroombanenmodel en grondwaterkwaliteitsmodel is door het volledig driedimensionale model STYXZ vervangen;
- In STYXZ is op verzoek van RIZA een aantal nieuwe formuleringen opgenomen met betrekking tot metaboliëtvorming, adsorptie aan DOC en redoxprocessen in het grondwater;
- De grafische naverwerking van het grondwatermodel is sterk gemoderniseerd en geschikt gemaakt voor de WINDOWS-omgeving;
- ORPHEUS is ingebouwd in een 'case management tool' waardoor de bediening van de verschillende modules binnen een WINDOWS-omgeving mogelijk is en hiermee sterk is vereenvoudigd;
- Er is een nieuwe uitvoerige gebruikershandleiding geproduceerd.

De specielaagmodule en de oppervlaktewatermodule van het oude ORPHEUS zijn gehandhaafd. De oppervlaktewaterkwaliteit kan, indien nodig, meer in detail worden beschreven met andere beschikbare modellen (DUFLOW, DELWAQ, DBS en IMPACT). De consolidatiemodule is verwijderd omdat blijkt dat hiervoor in het algemeen andere modellen toegepast worden zoals bijvoorbeeld FSCONBAG van Grondmechanica Delft. Conform de uitkomst van de STOWA-enquête is ook de ecotoxicologische data-base vervallen.

1.3 Opbouw ORPHEUS 2.0

ORPHEUS 2.0 bestaat uit een oppervlaktewatermodel en een grondwatermodel. Beide modellen kunnen in een gebruikersschil en 'case management tool' onder WINDOWS aangeroepen worden. In Figuur 1.1 wordt een overzicht gegeven van de twee opkomstschermen waaruit direct de opbouw van beide modellen blijkt. Het case management tool biedt hierbij de mogelijkheid om een bepaald voorbereikt scenario te kiezen of om een nieuw scenario aan te maken. De opbouw en de functionaliteit van de verschillende onderdelen wordt hieronder kort behandeld.

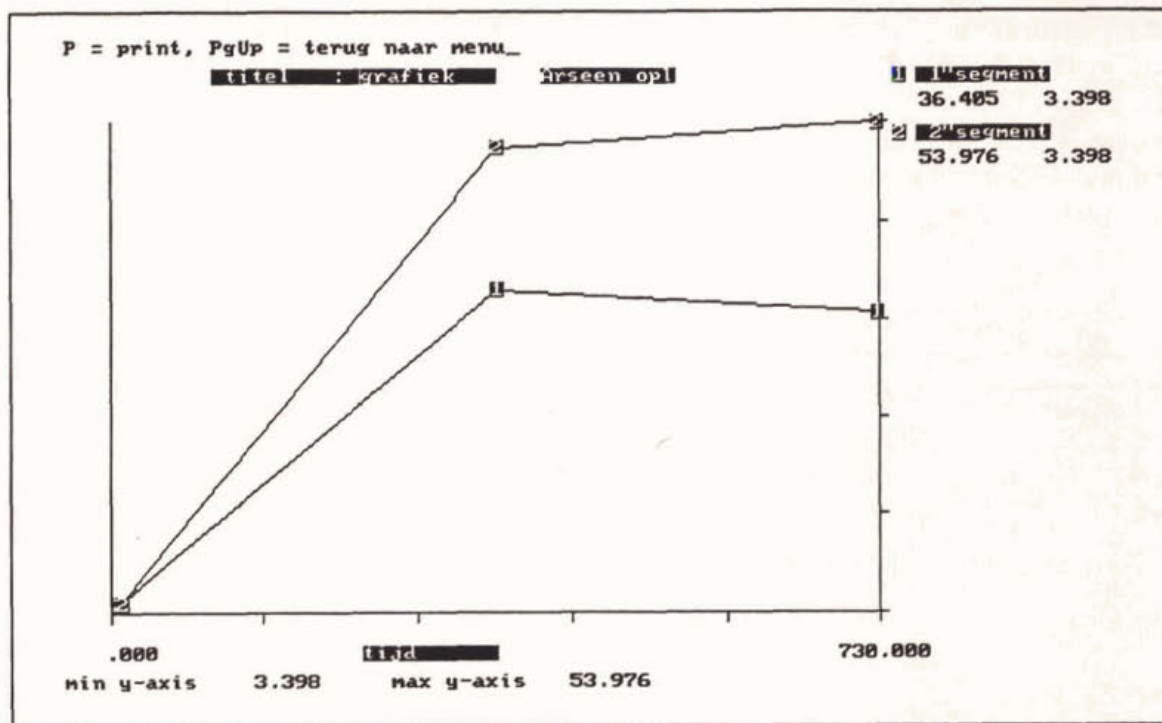


Figuur 1.1 Opkomstscherm van het oppervlaktewatermodel en het grondwatermodel bij ORPHEUS 2.0

Oppervlaktewater

Met het oppervlaktewatermodel kan de invloed van het storten van baggerspecie op de kwaliteit van het oppervlaktewater op de korte (maanden) en middellange (jaren) termijn bepaald worden. In het model zijn de processen in de sliblaag, de uitwisseling van verontreinigingen tussen de sliblaag en het oppervlaktewater, de processen in het oppervlaktewater en de uitwisseling met aangrenzend oppervlaktewater opgenomen. Het oppervlaktewater kan hierbij (tijdelijk) gestratificeerd zijn. Het storten van baggerspecie kan over een bepaalde periode gespreid worden en na het storten kan een afdeklaag aangebracht worden.

Het belangrijkste resultaat van het oppervlaktewatermodel bestaat uit de concentraties van verontreinigingen in het oppervlaktewater. Hierbij kan het verloop van deze concentraties gedurende het stortproces en na het aanbrengen van de afdeklaag bestudeerd worden. Het model bepaalt tevens het verloop van de nutriëntgehalten van het oppervlaktewater en van het zuurstofgehalte. De resultaten worden in files weggeschreven en kunnen met een visualisatiemodule op het scherm zichtbaar gemaakt worden. Figuur 1.2 geeft hiervan een voorbeeld.



Figuur 1.2 Voorbeeld van het resultaat van een berekening ten aanzien van de oppervlaktewaterkwaliteit. Hier wordt het verloop van het cadmiumgehalte in het oppervlaktewater gedurende -en na- een stortproces getoond.

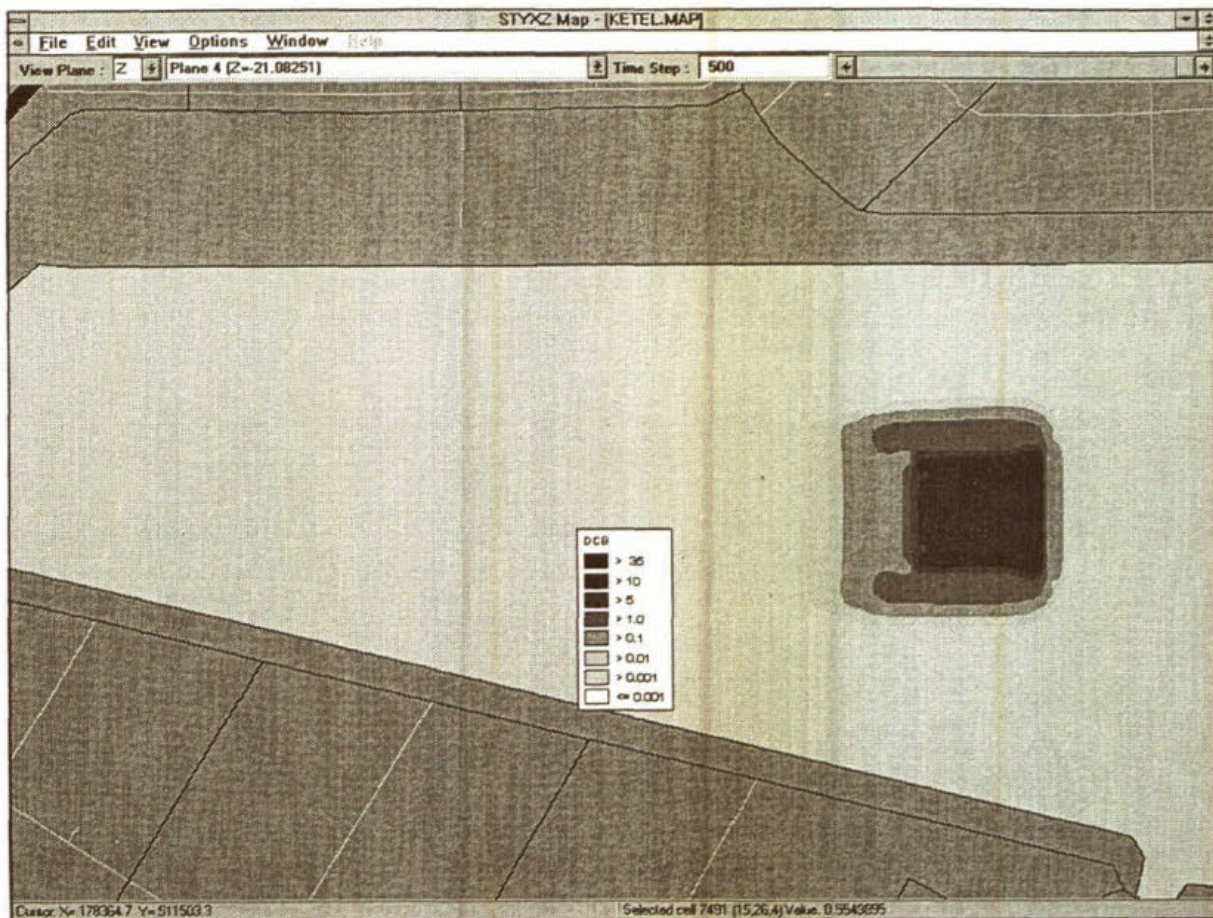
Grondwater

Het grondwatermodel berekent de verspreiding van verontreinigingen uit een baggerspeciedepot of een sliblaag naar het grondwater. Het model bestaat uit een geohydrologisch gedeelte (MODFLOW) en een transportgedeelte (STYXZ).

In het geohydrologische gedeelte wordt de ondergrond driedimensionaal verdeeld in watervoevende pakketten en scheidende lagen. Aan deze lagen worden geohydrologische parameters toegekend. Bovendien wordt het depot in het model opgenomen. Vervolgens bepaalt het geohydrologische model de stroming van het grondwater, die zichtbaar gemaakt kan worden in een isohypsenbeeld. Dit beeld kan geijkt worden op het isohypsenbeeld van een grondwaterkaart.

Met behulp van de grondwaterstroming wordt met het transportmodel het driedimensionale transport van verontreinigingen uit een depot bepaald. Hierbij wordt de nadruk gelegd op de organische verontreinigingen, omdat de meeste zware metalen in het gereduceerde milieu van het depot (vrijwel) niet mobiel zijn. Met het model kan voor de zware metalen een uitspraak gedaan worden over een eventuele verhoogde mobiliteit als gevolg van een verandering van de redox-toestand. Het transportmodel houdt rekening met adsorptieprocessen, vorming van metaboliëten, afbraak, diffusie en dispersie. De resultaten van de transportberekeningen kunnen met een kaart-georiënteerd presentatiemodel bestudeerd worden (Figuur 1.3).

De belangrijkste resultaten van de verspreidingsberekeningen zijn de parameterwaarden die met normen vergeleken kunnen worden. Dit is de flux aan verontreinigingen uit het depot en de omvang van het tot boven de streefwaarde verontreinigde volume. Beide waarden kunnen eenvoudig uit de berekeningsresultaten afgeleid worden. Bovendien kan met behulp van het model een uitspraak gedaan worden over de kwaliteit van een toe te passen isolatiemethode, over het rendement van geohydrologische isolatie en over de beste lokatiekeuze voor een depot.



Figuur 1.3 Voorbeeld van de verspreiding van fenantreen uit een depot. Hier wordt de concentratie in het eerste watervoerende pakket weergegeven na 500 jaar.

1.4 Toepassing van ORPHEUS 2.0

Wanneer kan ORPHEUS 2.0 toegepast worden?

ORPHEUS 2.0 is veel breder toepasbaar geworden dan het oude ORPHEUS. Deze brede toepasbaarheid betreft vooral het grondwater, waar de sterk vereenvoudigde (en uit transportoogpunt vaak verkeerde) stroombaanbenadering is vervangen voor een volledig driedimensionale aanpak. Met betrekking tot het oppervlaktewater geldt nog steeds dat ORPHEUS vooral toegepast moet worden bij speciëstoringen in een put. De diepte van de put en het uitwisselingsdebiet met de rivier zijn hierbij niet van belang. Als het effect van een sliblaag in een rivier op de oppervlaktewaterkwaliteit bestudeerd moet worden, dan kan beter een uitgebreider model zoals DELWAQ of DUFLOW toegepast worden.

Met betrekking tot het grondwater is de toepassing van ORPHEUS 2.0 vrijwel onbeperkt. Hier kan de lokale verspreiding uit diepe of ondiepe putten bepaald worden, maar ook de regionale verspreiding uit bijvoorbeeld de sliblaag op een rivierbodem. Voorbeelden hiervan zijn de verspreiding uit het Ketelmeerdepot en de verspreiding uit de sliblaag in het Hollandsch Diep die beide met het grondwatergedeelte van ORPHEUS bepaald zijn. Naast verspreiding uit een 'kaal' depot kan ook de verspreiding uit een geïsoleerd depot bepaald worden en kan het effect van bijvoorbeeld geohydrologische isolatie bepaald worden. In feite is de toepassing van het grondwatergedeelte van ORPHEUS 2.0 niet tot baggerspecie(depots) beperkt. Ook de verspreiding uit puntbronnen of uit bijvoorbeeld stortplaatsen kan ermee bepaald worden.

De belangrijkste beperking van het grondwatergedeelte van ORPHEUS 2.0 is dat er per berekening de verspreiding van slechts één stof bepaald kan worden. Dit betekent dat het transport van een reagerend mengsel van stoffen met ORPHEUS 2.0 niet bepaald kan worden. Wel wordt rekening gehouden met adsorptie en afbraak en kan de verplaatsing van een redoxfront onder invloed van zuurstof, methaan, sulfaat en ijzer bepaald worden. Bij baggerspeciedepots is het meestal geen probleem dat slechts één verbinding beschouwd kan worden omdat hierbij meestal alleen het transport van organische verontreinigingen van belang is. Als toch het transport van een reagerend mengsel bestudeerd moet worden, kan hiervoor gebruik gemaakt worden van het chemische model CHARON in combinatie met een tweedimensionaal grondwaterkwantiteitsmodel. Deze modellen zijn echter door hun grote complexiteit en hun beperkte toepassing niet in ORPHEUS 2.0 opgenomen.

Wat is er nodig voor de toepassing van ORPHEUS 2.0?

ORPHEUS 2.0 is opgebouwd uit wetenschappelijke modellen, waarin alle relevante processen zijn opgenomen. De gebruiker kan de rol van deze processen sturen met behulp van de modelinvoer. Door de opzet van ORPHEUS 2.0 zijn vrijwel alle onderdelen van het instrument eenvoudig bereikbaar.

Voor een zinvol gebruik van het oppervlaktewatergedeelte van ORPHEUS 2.0 is het echter noodzakelijk dat de gebruiker bekend is met processen die zich in het oppervlaktewater afspelen. Voor het grondwatergedeelte is een behoorlijke geohydrologische kennis en inzicht in transportprocessen noodzakelijk. Het is niet zo dat de gebruiker eenvoudigweg een verontreiniging invoert en dat het instrument vervolgens een verspreidingsberekening uitvoert. Modellen waarbij dit wel kan zijn in het algemeen zeer generalistisch van aard en kunnen niet op een specifiek geval toegesneden worden.

Indien met het model gerekend wordt, zullen parameterwaarden van het beschouwde systeem verzameld moeten worden. Dit betreft procesparameters, concentraties en systeempparameters. De waarden kunnen in de literatuur gevonden worden, maar kunnen vaak ook via metingen of schattingen verkregen worden. In ORPHEUS 2.0 zijn voor de meeste parameters defaultwaarden opgenomen, waarvoor echter per geval bekeken moet worden of deze inderdaad geldig zijn. Met gevoeligheidsanalyses kan een indruk verkregen worden van het belang van de verschillende parameters voor een specifiek geval.

ORPHEUS 2.0 werkt in de WINDOWS-omgeving. Dit betekent dat de gebruiker enige bekendheid moet hebben met het werken met personal computers en met Microsoft WINDOWS. In ORPHEUS 2.0 werkt de gebruiker met 'cases'. Een case is een verzameling in- en uitvoer die hoort bij een door te rekenen situatie. De cases worden beheerd door het Case Management Tool (CMT). Binnen het Case Management Tool worden invoerbestanden klaargezet, worden simulatiemodellen gestart en worden de resultaten geanalyseerd. Dankzij dit Case Management Tool wordt de file-administratie achter de schermen uitgevoerd en hoeft de gebruiker zich hier niet meer mee te bemoeien. De gebruiker krijgt dus alleen werkmenu's en scenariokeuzen op zijn scherm.

2 Voor u begint

Deze gebruikershandleiding bevat gedetailleerde informatie over het toepassen van ORPHEUS 2.0 onder Microsoft WINDOWS voor studies met betrekking tot stoftransport en de gevolgen van de berging van baggerspecie. In dit hoofdstuk wordt de opbouw van de handleiding toegelicht en worden de gebruikte typografische conventies vastgelegd.

2.1 ORPHEUS 2.0 systeemdokumentatie

Om u te helpen bij het leren werken met ORPHEUS 2.0, bevat de gedrukte informatie de volgende onderdelen:

Typografische conventies

In hoofdstuk 2.2 is een overzicht gegeven van typografische conventies die gehanteerd worden in de handleiding.

Introductie ORPHEUS 2.0

Voor diegenen die ORPHEUS niet kennen, bevat hoofdstuk 1 een introductie. Hierin wordt uitgelegd wat ORPHEUS is, waarvoor het bedoeld is, welke simulatiemodellen voor grondwater en oppervlaktewater zijn opgenomen en welke onderdelen van het beslissingsondersteunende systeem (DELFT DSS) zijn opgenomen in ORPHEUS 2.0.

Beginnen met het gebruik van ORPHEUS 2.0

In hoofdstuk 3 "Beginnen met het gebruik van ORPHEUS 2.0" zult u ontdekken hoe het uitvoeren van een analyse voor de berging van baggerspecie zo makkelijk mogelijk is gemaakt. U wordt in dit hoofdstuk stap voor stap door het instrument geleid, zodat u snel met de programma's vertrouwd zult raken.

Gebruik van de generieke programma's voor beslissingsondersteuning

In ORPHEUS 2.0 zijn onderdelen opgenomen van het DELFT DSS beslissingsondersteunende systeem. Het gebruik van die programma's wordt beschreven in hoofdstuk 4.

Opbouw systeem

In ORPHEUS 2.0 zijn simulatiemodellen voor de waterbeweging in de ondergrond (STYXZ en MODGRID), het stoftransport in de ondergrond (STYXZ) en de oppervlaktewatermodule uit ORPHEUS 1.0 opgenomen. In hoofdstuk 5 wordt beschreven hoe de verschillende modellen tot één instrument zijn gecombineerd.

Gebruik systeem

In hoofdstuk 6 wordt uitgelegd hoe met ORPHEUS 2.0 gewerkt moet worden. Omdat de verschillende modellen die in het instrument zijn opgenomen zeer veelzijdig zijn, wordt in dit hoofdstuk veelvuldig verwezen naar de handleidingen van de afzonderlijke modellen, die in de bijlagen zijn opgenomen.

Bijlagen

De bijlagen van ORPHEUS 2.0 bevatten handig technisch referentiemateriaal voor de simulatiemodellen en voor delen van het DELFT DSS beslissingsondersteunende systeem die zijn opgenomen in ORPHEUS 2.0. Tevens is achtergrondinformatie opgenomen zoals een definitie van gehanteerde termen in deze handleiding; een introductie van het DELFT DSS beslissingsondersteunende systeem.

Online Help

Waar beschikbaar, kan tijdens het draaien van een programma met de [F1] toets help informatie zichtbaar gemaakt worden. Programma's die van een dergelijke help toets zijn voorzien, zijn het schilprogramma WL_SHELL, het case management tool CMT en het presentatieprogramma STYXZMAP.

2.2 Typografische conventies

Voordat u begint met lezen in deze handleiding is het nuttig om de gehanteerde termen en typografische conventies te kennen.

2.2.1 Algemene conventies

In Bijlage A kunt u terecht voor een uitleg van de gehanteerde specialistische termen in deze handleiding.

Om aan te geven dat tekst een bijzondere betekenis heeft, maken we gebruik van de volgende typen van formatter opties:

Formatter optie	Betekenis
Speciale aandachtstreep (*)	Stap-voor-stap procedures. In deze procedures worden meestal zowel toetsaanslagen als muishandelingen vermeld. Bijvoorbeeld om een onderdeel van een menu te kiezen, kunt u de muis of een combinatie van toetsaanslagen gebruiken.
[...]	Toetsen op het toetsenbord worden aangeduid tussen [] haken. Bijvoorbeeld de Enter toets wordt aangeduid met [Enter]. Soms wordt in deze handleiding ook verwezen naar zogenaamde WINDOWS in bestanden. Deze bevatten programma-instellingen opgedeeld in secties. De titel van een dergelijke sectie wordt ook tussen [] haken vermeld. Bijvoorbeeld er bestaat een [386Enh] woord voor de "386 enhanced" sectie in het SYSTEM.INI bestand.
{...}	Optionele argumenten in een commandoregel van programma's worden aangegeven met tussen { } brackets. Bijvoorbeeld "Runs=program {/MIN}" betekent dat het argument /MIN toegevoegd mag worden.
Capitalized words	Keuzes uit menu-onderdelen of dialogen worden aangegeven met een hoofdletter als eerste letter. Bijvoorbeeld als u uit het Bestand menu de optie Einde kiest dan wordt dit aangegeven als "Bestand Einde".

<i>Cursief gedrukte woorden</i>	Met cursief gedrukte letters wordt in de tekst aangegeven dat één van de speciale woorden uit de Bijlage A voor de eerste keer verschijnt in de handleiding. Als u de term niet kent, dan kunt u de definitie lezen in Bijlage A. De namen van knoppen waarop u gevraagd wordt te drukken, zullen eveneens schuingedrukt verschijnen.
Woorden in KLEINE HOOFDLETTERS	De namen van programma's en instituten worden aangegeven met kleine hoofdletters. Bijvoorbeeld DELFT HYDRAULICS refereert naar ons en CMT verwijst naar het case management tool.
Vetgedrukte tekst	In de stap voor stap procedures betekent vetgedrukte tekst dat u gevraagd wordt om dat in te typen in uw computer.

2.2.2 Toetsenbordconventies

Formateer optie	Betekenis
Sneltoetsen	Combinaties van toetsaanslagen worden vaak gebruikt als sneltoetsen voor het uitvoeren van een programma of menu-optie. Bijvoorbeeld [Alt]+[F] betekent dat u de ALT toets ingedrukt houdt, terwijl u de F toets indrukt. Op dezelfde manier betekent [Alt],[F],[A] dat u de toetsen indrukt en weer loslaat.
Pijltjestoetsen	In deze handleiding gebruiken we de term pijltjestoetsen voor de volgende navigatietoetsen: [Up]; [Down], [Left], [Right]; [Home], [End], [PgUp] and [PgDn].
Numerieke toetsen	Als u een uitgebreid toetsenbord heeft, dan kunt u getallen intypen met de numerieke toetsen. Zorg er wel voor dat de [Num Lock] toets brandt.

2.2.3 Muisconventies

U kunt zowel een enkele als een meervoudige knoppen muis gebruiken met ORPHEUS 2.0, aangenomen dat de muis door WINDOWS wordt geaccepteerd.

- Als u een meervoudige knoppen muis heeft, dan zult u normaal gesproken alleen de linker muistoets gebruiken. Sommige programma's laten onder de rechter muisknop een menu zien dat speciaal toegesneden is op het geselecteerde object.
- "Aanwijzen" betekent het positioneren van het muissymbool op de gewenste plek op het scherm.
- "Klikken" betekent het indrukken en meteen weer loslaten van de muisknop, zonder daarbij de muis te verplaatsen. Dubbel klikken is twee keer, snel na elkaar klikken.
- "Sleep" betekent het aanwijzen van een object; de muis indrukken en dan de muis te verplaatsen zonder de muis knop los te laten. Op deze manier worden in WINDOWS objecten verslept.

Voor ORPHEUS 2.0 is het aan te raden om te beschikken over een muis en over vaardigheid in het gebruik van WINDOWS programma's. Als u dat niet heeft, dan raden wij aan om eerst de basis-vaardigheden van WINDOWS te leren. Dat kan bijvoorbeeld door het WINTUTOR.EXE programma te gebruiken. Dit programma hoort bij WINDOWS. U kunt natuurlijk ook de WINDOWS handleiding doorlezen.

2.3 ORPHEUS 2.0 Help Desk

Als u vragen heeft over ORPHEUS 2.0 zoek dan eerst in de handleiding of de Online help naar een antwoord. U kunt de laatst binnengekomen nieuwtjes en technische informatie vinden in het README bestand. Als u het antwoord niet kunt vinden, dan kunt u contact opnemen met WL.

Contact opnemen met de ORPHEUS 2.0 Help Desk

U kunt contact opnemen met WL via de fax (heeft onze voorkeur), via de telefoon of e-mail (ook erg handig). Het is erg praktisch als u een internet aansluiting hebt, omdat er dan snel files uitgewisseld kunnen worden via onze FTP-site. Hier kunt u via FTP anoniem op inloggen en vervolgens files uploaden/downloaden. Als u contact opneemt, dan moet u de volgende informatie klaar hebben om door te geven:

- Het versienummer van het onderdeel van ORPHEUS 2.0 waar het probleem ontstond;
- Een omschrijving van uw PC (processor, harde schijf, geheugen, cache, netwerk, enzovoort);
- De DOS en WINDOWS versie die u gebruikt;
- De exacte bewoording van eventuele foutboodschappen die op uw scherm verschijnen;
- Een beschrijving van wat er gebeurde en wat u aan het doen was op dat moment;
- Een beschrijving van wat u geprobeerd hebt om het probleem op te lossen;
- Kunt het probleem reproduceren door dezelfde handelingen te verrichten?

U kunt op de volgende manieren contact opnemen met WL:

Via de fax (voorkeursmethode):

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM
ORPHEUS 2.0 help desk
faxnummer: (+31) 015-2619674

Via de telefoon:

tel: 015-2569353
Vraag naar Harm Gerrits of
Poul Grashoff

Via e-mail:

harm.gerrits@wldelft.nl of
poul.grashoff@wldelft.nl

FTP-site:

host: FTP.WLDELFT.NL
login: anonymous
password: email adres
directory: pub/orpheus

2.4 Installatie van ORPHEUS 2.0

2.4.1 Kopiëren van de diskettes

Voordat u begint met het installeren van ORPHEUS 2.0, kunt u het beste een reservekopie maken van de installatiediskettes. De licentievoorwaarden van ORPHEUS 2.0 staan het maken van een reserve-kopie van de installatiediskettes toe. Voor meer informatie kunt u de licentie van ORPHEUS 2.0 raadplegen.

2.4.2 Minimum systeemeisen

Door het gebruik van WINDOWS is ORPHEUS 2.0 in staat om meerdere onderdelen tegelijk te laten draaien, mits uw systeem daartoe geschikt is. Het is van belang om te onderzoeken of de computer waarop u ORPHEUS 2.0 wilt installeren geschikt is. Temeer daar de simulatiemodellen van ORPHEUS 2.0 vrij grote schematisaties aan kunnen, hetgeen voldoende geheugen en een snelle processor vereist. Voor ORPHEUS 2.0 zijn de minimum eisen aan de computer als volgt:

- Microsoft DOS 5.0 of hoger
- Microsoft WINDOWS operating system versie 3.11 of hoger
- Een PC met 80486DX processor, draaiend op 33 MHz of meer
- Tenminste 16 MB RAM geheugen
- Tenminste een VGA scherm met video-kaart (met WINDOWS-versneller)
- Tenminste 50 MB vrije ruimte op de harde schijf
- Een 1.44 MB diskette station (voor de installatie)
- Een muis beschikbaar onder DOS (absoluut noodzakelijk)

Er is een aantal manieren om uw PC zo optimaal mogelijk te laten functioneren. Indien mogelijk, moet u bijvoorbeeld de 32-bits toegang tot de harde schijf aanzetten. Hierdoor hebben alle programma's snellere toegang tot gegevens op de harde schijf. Voor meer informatie hierover kunt u uw WINDOWS handleiding raadplegen. In hoofdstuk 14 daarvan wordt ingegaan op onder meer het geheugengebruik en het virtueel geheugen.

2.4.3 De installatieprocedure voor ORPHEUS 2.0

Voor de installatie van ORPHEUS 2.0 dient de volgende procedure doorlopen:

» **Installatie van ORPHEUS 2.0:**

1. Zorg ervoor dat uw computer en monitor aanstaan en dat u WINDOWS op de juiste wijze heeft geïnstalleerd.
2. Als WINDOWS nog niet draait, start WINDOWS door vanaf de DOS prompt (bijvoorbeeld C:\>) **win** in te typen en op [Enter] te drukken. Als WINDOWS al draait, sluit dan alle draaiende programma's (behalve de PROGRAM MANAGER zelf). Ga naar de PROGRAM MANAGER door op dat WINDOW te klikken, of dubbel te klikken in het geval dat de PROGRAM MANAGER als icoon te zien is.
3. Doe diskette gemerkt met "Disk 1 - Setup" in diskette station A of B. Deze diskette bevat het programma SETUP.EXE.
4. Kies de optie "Run" van het File menu van de PROGRAM MANAGER.
5. Typ **a:setup** of **b:setup** (afhankelijk van het diskettestation waar de setup diskette zich bevindt) in de commando regel en klik op **OK**.
6. Het installatieprogramma start nu op. Volg de instructies van het programma. Eén van de vragen is bijvoorbeeld op welke schijf u het programma wilt installeren. Zorgt u ervoor dat u een schijf opgeeft met minstens 30 MB vrije schijfruimte. Regelmatig zal gevraagd worden om de volgende diskette erin te stoppen.
7. Het programma kopieert de gecomprimeerde bestanden vanaf diskette en pakt daarna de bestanden uit.
8. In het autoexec.bat bestand van uw computer worden mogelijk ook enkele wijzigingen aangebracht. Om het programma te kunnen gebruiken, moet u daarom WINDOWS verlaten en het autoexec.bat programma draaien.
9. Hierna kunt u WINDOWS opnieuw opstarten.
10. Aan de programmagroepen van de PROGRAM MANAGER is door het installatieprogramma een groep ORPHEUS 2.0 toegevoegd met daarin enkele iconen. U kunt nu eerst het LEESMIJ icoon opstarten of meteen het ORPHEUS 2.0 icoon. Nu bent u zover dat u ORPHEUS 2.0 kunt gaan gebruiken. In geval van problemen kunt u contact opnemen met de ORPHEUS 2.0 help desk.

Extra informatie betreffende de installatie

- In stap 6 worden op de door u aangegeven schijf een groot aantal bestanden en directories geïnstalleerd. Deze zijn nodig voor het draaien van de simulatiemodellen en voor de generieke hulpprogramma's van Delft DSS. Een overzicht van de directory structuur en uitleg wordt gegeven in het LEESMIJ.TXT bestand.
- Bekende problemen met het installatieprogramma zijn:
 - * SETUP.EXE moet enkele bestanden naar de Windows directory kopiëren. Als deze bestanden al bestaan dan kunt de foutmelding "Can't copy file ..." krijgen. De oplossing is het betreffende bestand een andere naam te geven. De fout zit in het installatieprogramma SETUP.EXE van Microsoft. De bestanden waar het meestal om gaat heten VER.DL in de WINDOWS directory; en VBRUN300.DLL, THREED.VBX en CMDIALOG.VBX in de WINDOWS\SYSTEM directory. Na afloop van de installatie kunt u desgewenst de bestanden weer hun originele naam geven. Hierbij gaan de geïnstalleerde bestanden verloren.

3 Beginnen met het gebruik van ORPHEUS 2.0

3.1 Inleiding

In dit hoofdstuk zult u ontdekken hoe het uitvoeren van een analyse voor de berging van baggerspecie zo makkelijk mogelijk is gemaakt. Volg gewoon met behulp van de computer de beschreven stappen voor het werken met cases in ORPHEUS 2.0 in de bijgeleverde voorbeeldstudie.

Als u ORPHEUS 2.0 start, zult u het opkomstscherf krijgen dat in Figuur 3.1 wordt weergegeven. Op dit scherm is een pijltje aanwezig dat met de muis verplaatst kan worden. Alle keuzen worden met dit pijltje gemaakt. Het CMT kan verlaten worden met de knop 'verlaat ORPHEUS 2.0 schil' die aan de rechter zijde van het scherm is te vinden.



Figuur 3.1 Opkomstscherf van ORPHEUS 2.0, keuzen kunnen met de muis aangeklikt worden

Aan de bovenrand is een aantal opties die te maken hebben met scenariobeheer en met het ontwerp van het modelinstrument. Aan de rechterzijde van het scherm zijn de knoppen aanwezig waarmee het oppervlaktewater en het grondwatermodel gestart kunnen worden. De verschillende opties worden actief nadat deze met de muis zijn aangeklikt.

Bij het werken met ORPHEUS 2.0 zijn vier basisactiviteiten te onderscheiden:

Ontwerp modellschema

Hier bestaat de mogelijkheid om het modellschema aan te passen. Er kunnen bijvoorbeeld programma's toegevoegd of verwijderd worden of er kunnen nieuwe acties geformuleerd worden. Omdat deze aanpassingen nogal vergaande gevolgen hebben voor de structuur van het ORPHEUS zoals dat in de handleiding wordt beschreven, zal op de aanpassingen niet worden ingegaan. Het wordt afgeraden eigenhandig aanpassingen in dit schema aan te brengen.

Oppervlaktewaterkwaliteitsberekening

Hier kan de oppervlaktewaterkwaliteit bepaald worden. Deze berekening staat geheel los van de grondwaterkwaliteitsberekening. De ingestelde parameterwaarden, concentraties en reketijden worden dus **niet** naar het grondwatermodel doorgegeven. Hoe met het oppervlaktewatermodel gewerkt moet worden, wordt in paragraaf 3.2 beschreven.

Grondwaterkwaliteitsberekening

De grondwaterkwaliteitsberekening is het meest complexe deel van ORPHEUS. Het bestaat uit een aantal invoerprogramma's, een geohydrologisch model, een transportmodel en een aantal analyseprogramma's. Bij de grondwaterberekening wordt eerst de grondwaterstroming bepaald en vervolgens het stoftransport dat door deze stroming wordt veroorzaakt. Het werken met het grondwatermodel wordt in paragraaf 3.3 verder toegelicht.

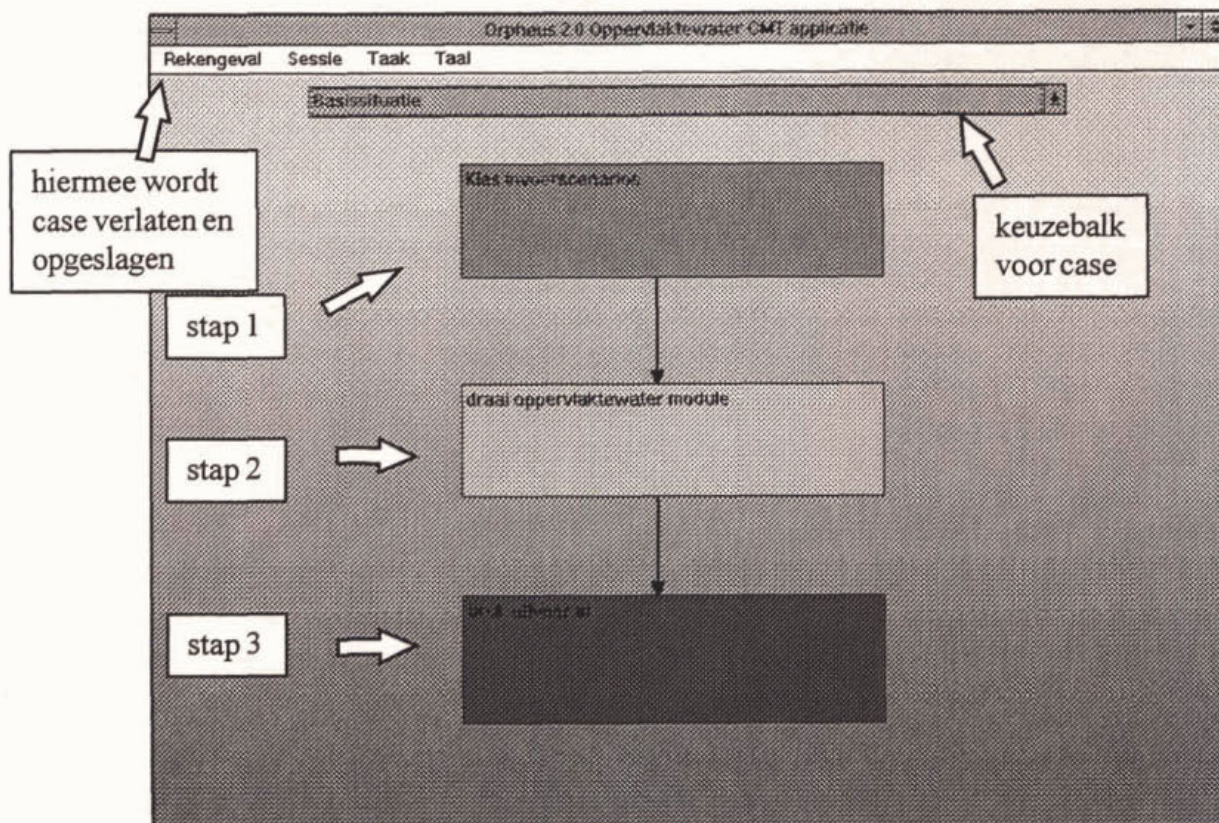
Scenariobeheer

Bij het scenariobeheer kunnen nieuwe scenario's geformuleerd worden voor de consolidatie, de speciekwaliteit, de oppervlaktewater default waarden en de hydrologische schematisatie. Bij aanmaak van een nieuw scenario wordt een oud scenario gekopieerd en vervolgens aangepast. Dit nieuwe scenario wordt automatisch aan de lijst van scenario's toegevoegd waaruit bij de berekening gekozen kan worden. Het scenariobeheer zal in paragraaf 3.4 verder worden toegelicht.

De verschillende activiteiten zullen in de volgende paragrafen achtereenvolgens behandeld worden. Hierbij wordt gebruik gemaakt van een case die inmiddels in ORPHEUS 2.0 is opgenomen. Er zal stap-voor-stap uitgelegd worden hoe met deze case gewerkt kan worden. Het wordt aangeraden de verschillende stappen op de computer te volgen.

3.2 Draai oppervlaktewatermodellen

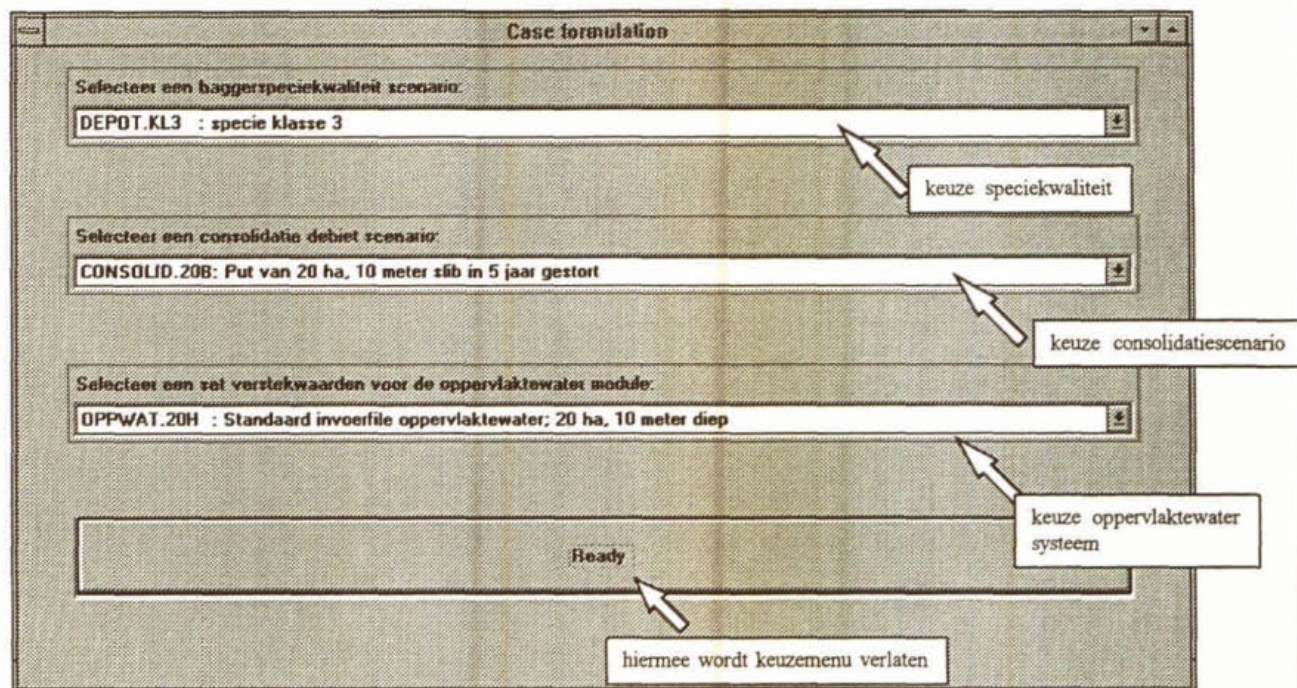
Het oppervlaktewater-CMT wordt gestart door de keuzemogelijkheid 'draai oppervlaktewatermodellen' in het opkomstscherf van ORPHEUS 2.0 aan te klikken (Figuur 3.1). Er verschijnt dan het opkomstscherf van het oppervlaktewater CMT ('oppervlaktewater ORPHEUS 2.0 CMT applicatie') dat in Figuur 3.2 is weergegeven. Vervolgens moet een case gekozen worden. Dit gebeurt met de brede keuzebalk die zich boven het schema van het oppervlaktewatermodel bevindt. Er is slechts één keuze beschikbaar: 'basissituatie'. Deze keuze kan gemaakt worden door hem met de muis aan te klikken.



Figuur 3.2 Opkomstscherf van het oppervlaktewaterkwaliteitsmodel

Nadat een case is geselecteerd, zullen de blokken van het schema gekleurd worden. In dit geval wordt de bovenste optie ('kies invoerscenario's') groen, het middelste blokje ('draai oppervlaktewater module') geel en het onderste blokje ('druk uitvoer af') rood. Groen betekent dat die taak reeds is uitgevoerd, geel betekent dat de taak uitgevoerd kan worden en rood betekent dat de taak nog niet uitgevoerd mag worden.

De case kan gedefinieerd worden door het bovenste blok aan te klikken: kies invoerscenario's. Er verschijnt een scherm ('case formulation') waarin een baggerspeciekwaliiteit, een consolidatiescenario en een oppervlaktewaterdefinitie gekozen kan worden (Figuur 3.3). De scenario's die gekozen kunnen worden, kunnen met behulp van de 'beheer-opties' ingesteld worden. Hoe dit in zijn werk gaat, wordt in paragraaf 3.4 beschreven.



Figuur 3.3 Keuzemenu waaruit een oppervlaktewater kwaliteitssom kan worden samengesteld; eigen scenario's kunnen naar wens toegevoegd worden

Als voorbeeld wordt de volgende keuze gemaakt:

- selecteer een baggerspeciekwaliteitsscenario: specie klasse 3
- selecteer een consolidatiedebietsscenario: put van 20 ha, 10 meter slib in 5 jaar
- selecteer een set verstekwaarden voor de oppervlaktewatermodule: standaard invoer oppervlaktewater: 20 ha, 10 meter diep

De case definitie wordt beëindigd door de knop 'ready' aan te klikken. Hierna verschijnt het schema met de verschillende taken weer. De taak 'kies invoerscenario's' is groen, de taak 'draai oppervlaktewater module' is geel en de taak 'druk uitvoer af' is rood.

Nadat een case is gedefinieerd, kan het oppervlaktewatermodel gedraaid worden. Hiertoe moet de middelste taak ('draai oppervlaktewater-module') geselecteerd worden. Na selectie zal het oppervlaktewatermodel gestart worden en verschijnt het keuze menu van het oude oppervlaktewatermodel. Indien dit gewenst is, kunnen met de opties 'kies de te modelleren stoffen' of 'invoeren van gegevens' aanpassingen in het model aangebracht worden. In dit voorbeeld wordt met het uit default waarden samengestelde model verder gerekend. Dit is dus een model waarin de metalen koper, cadmium, lood, zink, chroom en arseen en de organische verontreinigingen DCB, lindaan, fenantreen, fluorantheen, benzo(a)pyreen en PCB-52 zijn opgenomen.

Het oppervlak van het depot is 20 ha, de put is 10 meter diep en er wordt in 5 jaar 10 meter specie van de klasse 3 gestort. De rest van de waarden kunnen bij de keuze 'invoeren van gegevens' bekeken worden.

Het oppervlaktewatermodel wordt geactiveerd met de keuze 'rekenen'. In het default model is een periode van 730 dagen gekozen (2 jaar) met een tijdstap van 1 dag. Nadat 'rekenen' is gekozen begint de berekening. Een teller laat het verloop hiervan op het scherm zien. Vervolgens kunnen de resultaten met de optie 'plotten' op het scherm getoond worden. Hierbij wordt de oude naverwerking gestart.

Het oppervlaktewatermodel wordt verlaten met de keuze 'ga terug ORPHEUS'. Nadat deze keuze is gemaakt, moeten de vragen 'invoer overschrijven' en 'uitvoer bewaren' met 'ja' beantwoord worden en moet als extensie voor de uitvoerfiles 'UIT' meegegeven worden. Vervolgens verschijnt het takenschema van het CMT weer op het scherm. Nu is de taak 'kies invoerscenario's' groen, de taak 'draai oppervlaktewatermodule' groen en de taak 'druk uitvoer af' geel.

Met de taak 'druk uitvoer af' kan nu het programma 'NOTEPAD' gestart worden. Met dit programma wordt de standaard uitvoerfile van het oppervlaktewatermodel op het scherm zichtbaar gemaakt. Met de keuze 'print' onder de optie 'file' kan de file naar de printer gestuurd worden. Met de keuze 'exit' bij de optie 'file' wordt NOTEPAD weer verlaten. De file moet niet bewaard ('save') of onder een andere naam bewaard ('save as') worden, omdat in dat geval het CMT verstoord wordt.

Nadat een taak in het CMT is beëindigd kan de case opgeslagen worden met de optie 'rekengeval' in de menubalk. Als de case onder dezelfde naam bewaard moet worden, moet 'bewaar' gekozen worden. Als de case onder een nieuwe naam bewaard moet worden, moet 'bewaar als' geselecteerd worden en moet vervolgens een nieuwe naam ingevoerd worden. Om dit te illustreren kan het voorbeeld nu als de case 'som1' bewaard worden. Als vervolgens de brede keuzebalk voor de cases wordt aangeklikt, zijn er twee cases beschikbaar: 'voorbeeld' en 'som1'. Het oppervlaktewaterinstrument wordt verlaten met de keuze 'beëindigen' onder de optie 'rekengeval'. Indien een waarschuwing verschijnt dat alle files verwijderd zullen worden, moet de case eerst opgeslagen worden. Als een case verwijderd moet worden, kan dit met de keuze 'wissen' onder de optie 'rekengeval' gebeuren.

3.3 Draai grondwatermodellen

3.3.1 Beschrijving geohydrologische model

Als voorbeeld is een sterk vereenvoudigd model van het Ketelmeer met en zonder slibdepot in het CMT opgenomen. Het voordeel van deze vereenvoudiging is dat de invoer betrekkelijk eenvoudig beschreven kan worden en dat de rekentijd betrekkelijk kort is. Allereerst zal kort de opbouw van dit model beschreven worden.

Geohydrologisch is het Ketelmeer in het voorbeeld opgedeeld in vier verschillende lagen: een deklaag, het eerste watervoerend pakket, een scheidende laag (hier goed doorlatend) en het tweede watervoerende pakket. In het geohydrologische model zijn zes modellen gebruikt, waarvan de geohydrologische parameters in Tabel 3.1 zijn weergegeven. Voor de eenvoud is aangenomen dat de geohydrologische parameters in de ruimte niet variabel zijn (uiteraard is dit in werkelijkheid niet het geval!).

Tabel 3.1 Overzicht van de geohydrologische opbouw van het voorbeeldmodel

		dikte (m)	horizontale doorlatendheid (m/d)	verticale doorlatendheid (m/d)
modellaag 1	deklaag	3 m op land, 5 onder water	0.001	0.5E-04
modellaag 2	wvp 1	10	20	2
modellaag 3	'scheidende' laag	15	10	1
modellaag 4	wvp 2	20	40	4
modellaag 5	wvp 2	20	40	4
modellaag 6	wvp 2	50	40	4

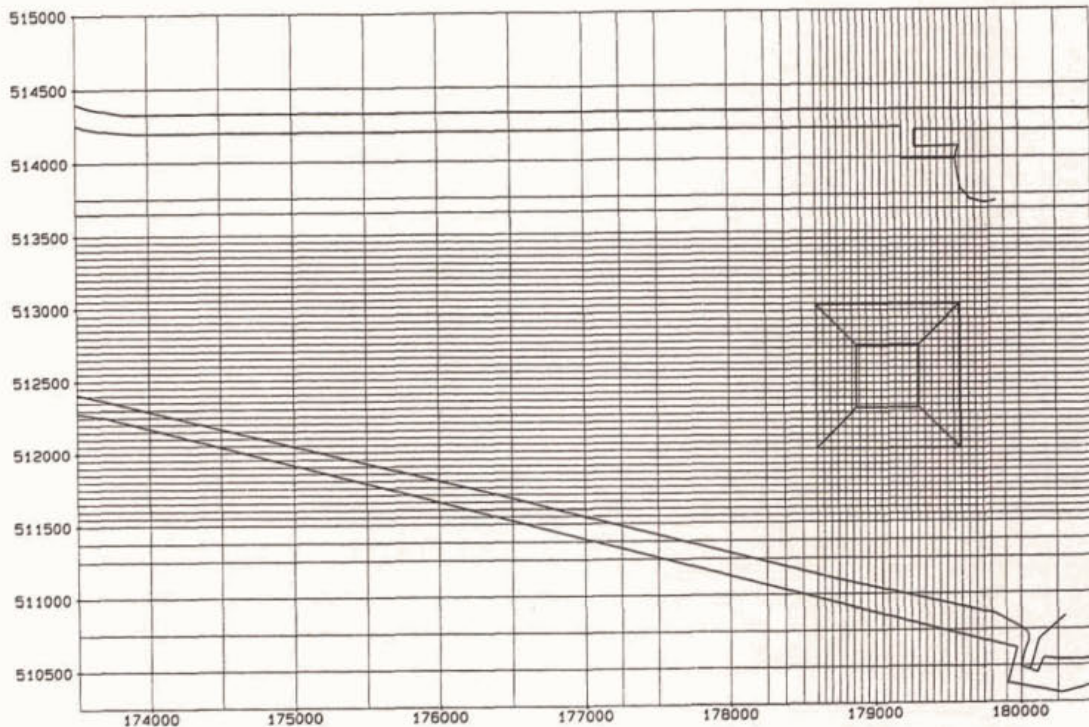
In het model met een depot is een depot aangebracht van 40 meter dik. Dit depot ligt tussen de 30 meter onder NAP en de 10 meter boven NAP. Het is geplaatst in de modellen 1, 2 en 3. De dikte van het depot in laag 1 is 15 meter, in laag 2 10 meter en in laag 3 weer 15 meter. De verticale doorlatendheid van het depot is 1.67E-04 d/m, hetgeen een totale depotweerstand van 25000 dagen oplevert. Dit is een lage waarde in vergelijking tot de waarden die in de praktijk voorkomen (orde 250000 dagen). Indien een hogere waarde wordt gebruikt, zal de uitloging veel trager verlopen, zodat langer moet worden doorgerekend voordat een redelijke verspreiding verkregen wordt.

De verschillende onderdelen van het geohydrologische model worden met behulp van eigenschapnummers van elkaar onderscheiden. Bij het voorbeeldmodel zijn de eigenschapnummers in het algemeen aan de modellen gekoppeld. De gebruikte nummering is in tabel 3.2 weergegeven.

Tabel 3.2 Nummering van de verschillende onderdelen van het geohydrologische model

eigenschapnummer	onderdeel model
1	deklaag op land
2	deklaag onder water
3	1e watervoerende pakket
4	'scheidende' laag
5	bovenzijde 2e watervoerende pakket
6	midden 2e watervoerende pakket
7	onderzijde 2e watervoerende pakket
8	onderlaag slibdepot (15 meter)
9	midden slibdepot (10 meter)
10	bovenzijde slibdepot (15 meter)

Het model is ingevoerd in een rekengrid dat bestaat uit 42 kolommen (X) en 51 rijen (Y). Figuur 3.4 geeft een afbeelding hiervan. Het model wordt (in meters) begrensd door de coördinaten (173500, 510250) en (180500, 515000).

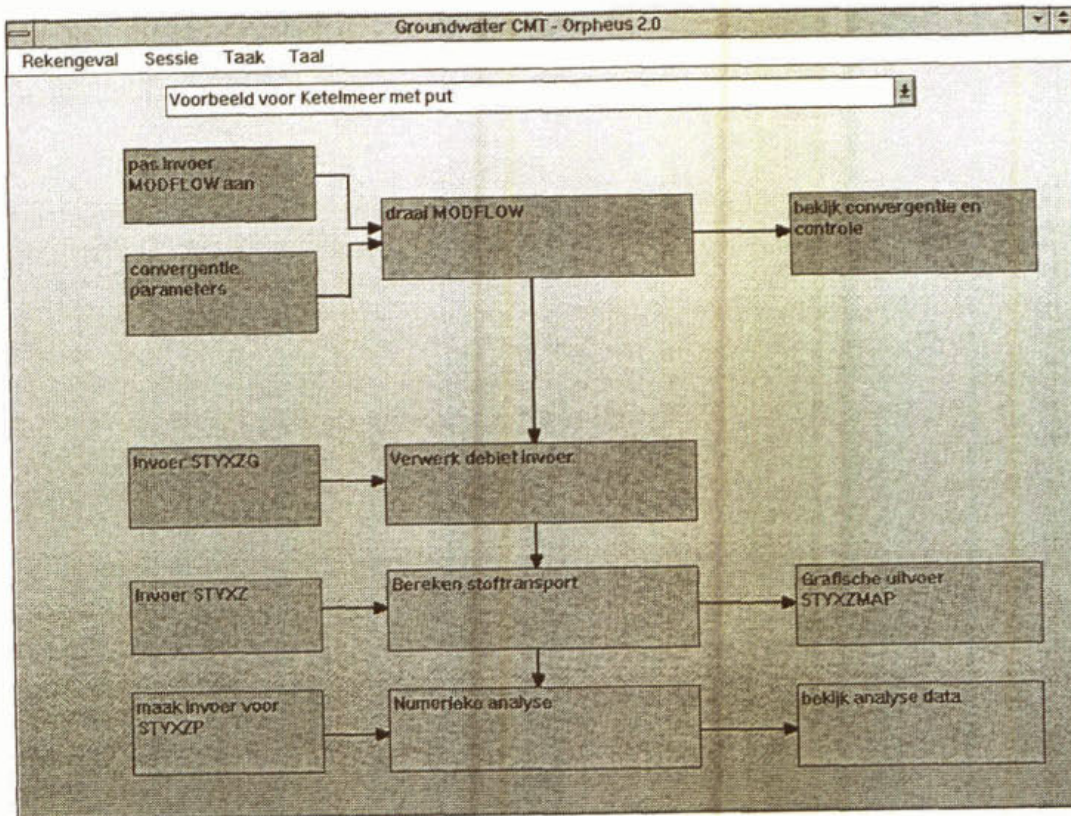


Figuur 3.4 Rekengrid dat bij de grondwatermodellering wordt gebruikt; dit grid bevat 42 kolommen en 51 rijen

3.3.2 Rekenen met het grondwatermodel

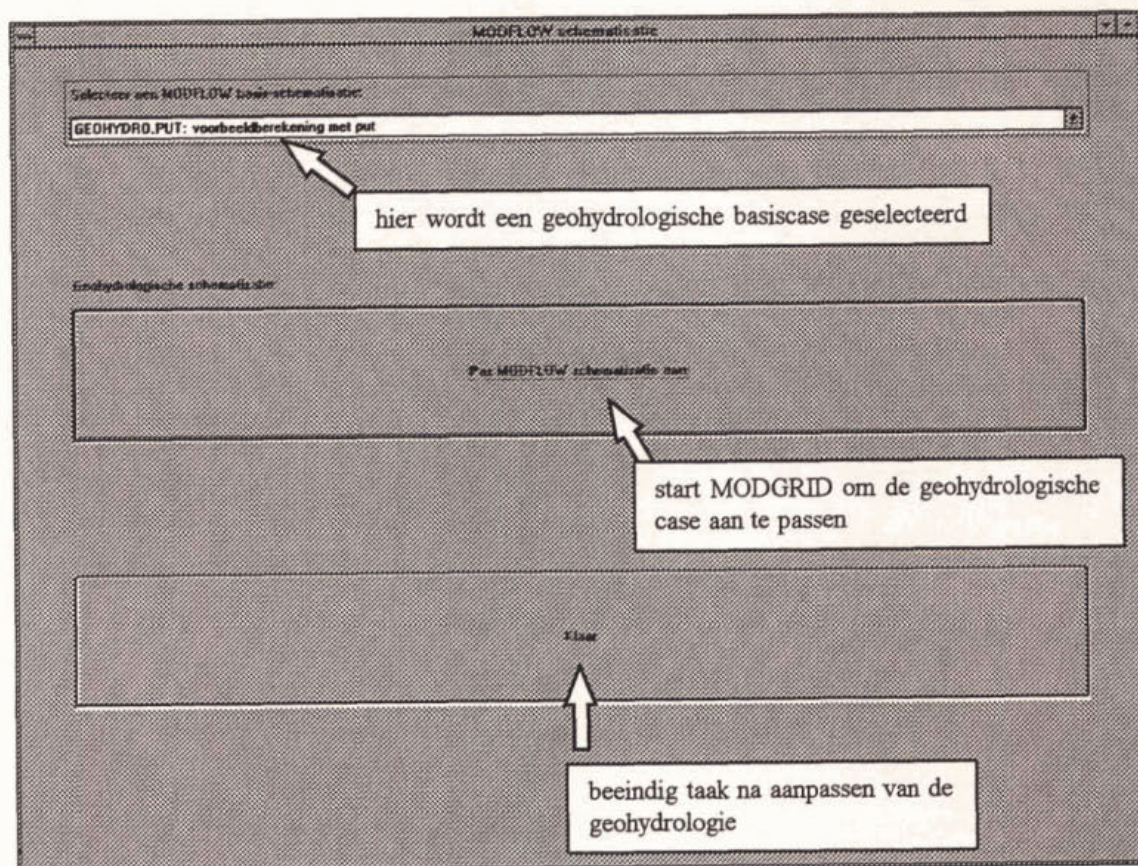
Evenals bij het oppervlaktewatermodel zal bij het grondwatermodel een berekening stap-voor-stap doorlopen worden. Hierbij kunnen niet alle mogelijkheden behandeld worden omdat dit er zeer veel zijn. Voor een verdere uitwerking van een berekening wordt dan ook naar de handleidingen van MODGRID, MODFLOW en STYXZ verwezen (bijlagen).

Het grondwaterinstrumentarium wordt gestart door de keuze 'draai grondwatermodellen' aan te klikken in het hoofdscherm van het CMT (Figuur 3.1). Als dit is gedaan verschijnt het grondwaterinstrument (Figuur 3.5). In de brede case-keuzenbalk moet nu 'voorbeeld1' gekozen worden.



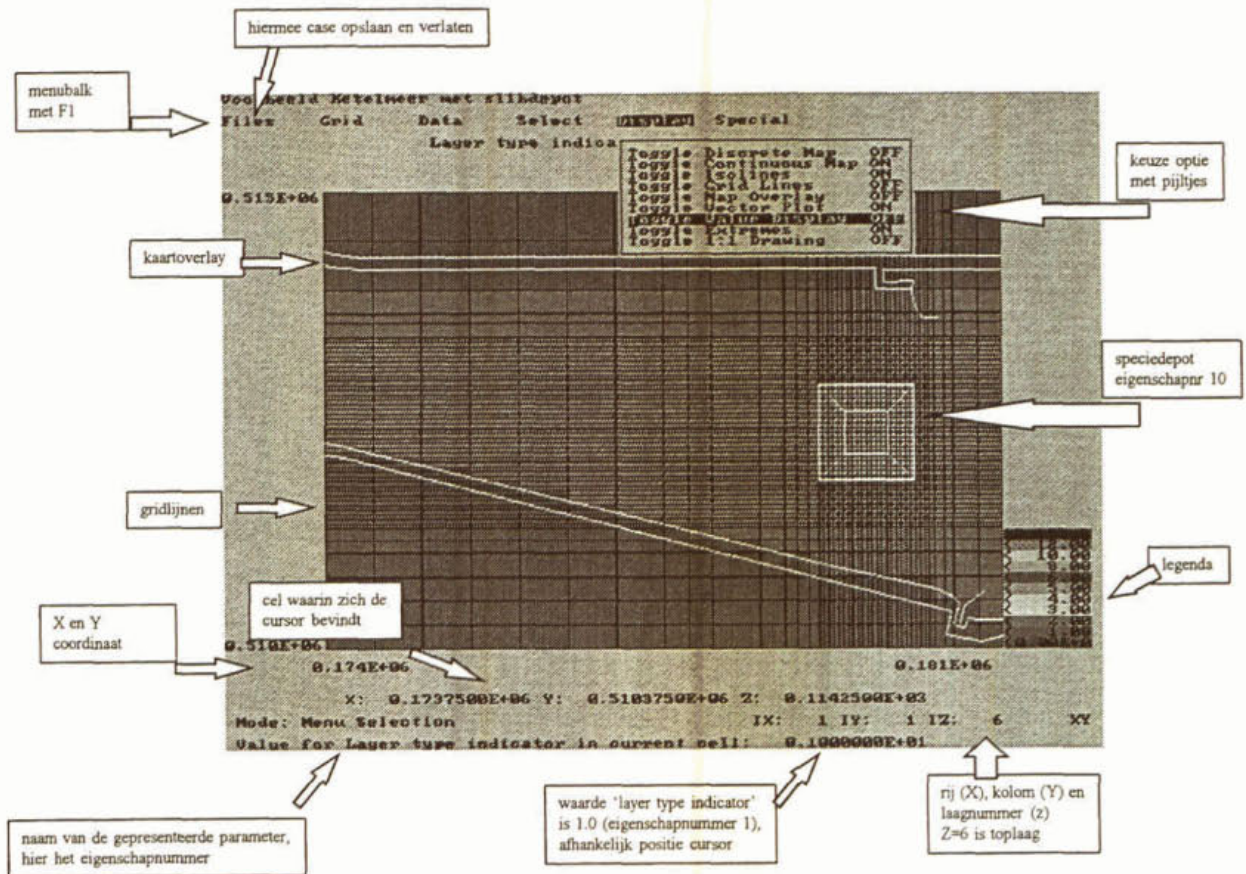
Figuur 3.5 Opkomstscherm van het grondwater-CMT

Nadat de case is gekozen, zullen de verschillende taken ingekleurd worden, al naar gelang hun status (groen is gereed, geel kan gestart worden, rood kan niet gestart worden, paars is bezig). De berekening moet bij de eerste taak begonnen worden: 'pas invoer MODFLOW aan'. Vervolgens verschijnt een keuzemenu waar bij de optie 'selecteer een MODFLOW basis schematisatie' gekozen kan worden uit twee schematisaties (Figuur 3.6). Bij dit voorbeeld wordt de 'voorbeeldberekening met put' gekozen.



Figuur 3.6 Keuzemenu voor grondwatersysteem en start van MODGRID

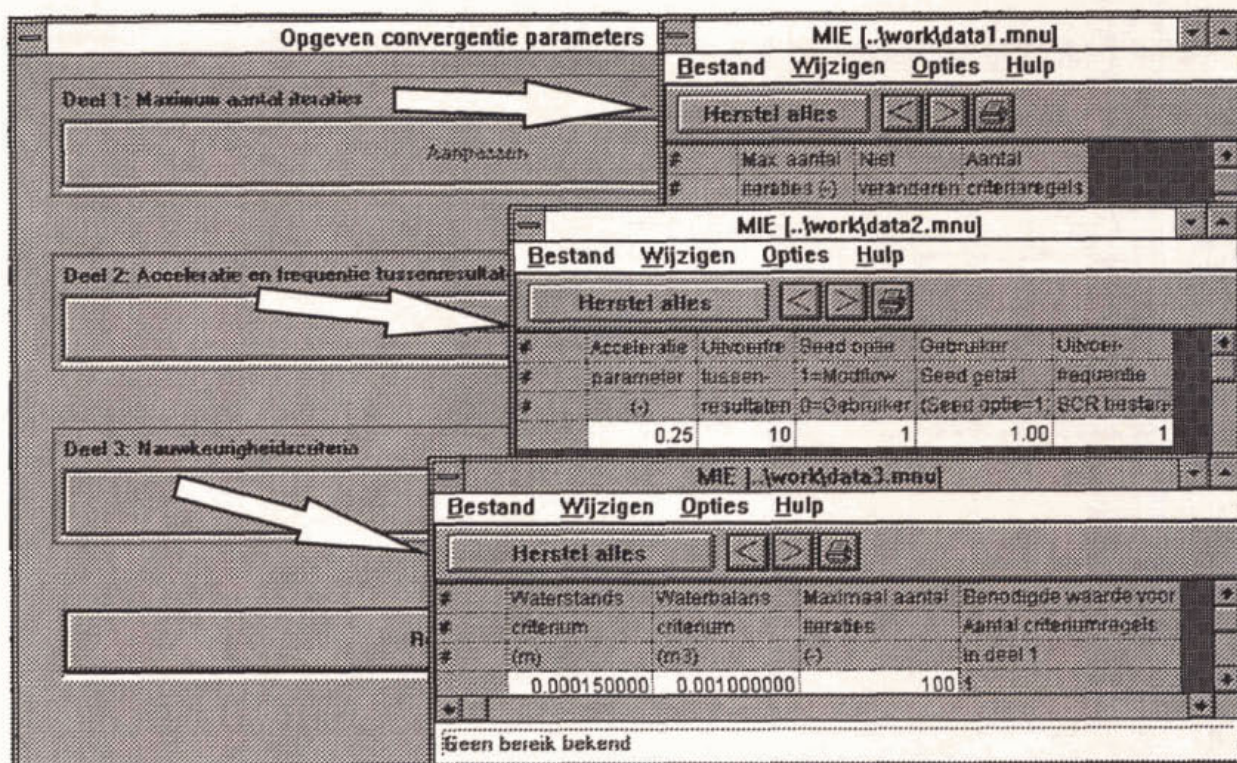
Nadat deze keuze is gemaakt kan het geohydrologische model aangepast worden met de optie 'pas MODFLOW schematisatie aan'. Deze keuze kan gemaakt worden voor een kennismaking met MODGRID. Na het starten verschijnt een opkomstscherf met een kaartje van het Ketelmeergebied (Figuur 3.7). Met F1 kan een menubalk zichtbaar gemaakt worden. Bij de optie 'data' kan met de keuze 'set actieve parameter' een parameter geselecteerd worden die op het scherm wordt gepresenteerd. De keuzemogelijkheid verschijnt in de onderrand van het scherm. Met de pijltjes-toetsten kan een keuze gemaakt worden. Kies bijvoorbeeld 'Layer type indicator'. Dit is het eigenschapnummer dat in Tabel 3.2 is weergegeven. De waarden worden in de kaart ingevuld na het intypen van een 'd'. Met de pijltjestoetsen kan vervolgens een cursor over de kaart bewogen worden. Met [CTRL] ← of [CTRL] → kan naar een andere modellaag gesprongen worden. In modellaag 1 (Z=6) is bijvoorbeeld de ligging van het depot goed te zien. Het rekgriid kan getoond worden met de optie 'display' en de keuze 'toggle grid lines'. Met dezelfde optie kunnen bijvoorbeeld ook de getalswaarden ('toggle value display') zichtbaar gemaakt worden. Voor een verdere beschrijving van de mogelijkheden van MODGRID wordt naar de handleiding hiervan verwezen. MODGRID wordt verlaten met de keuze 'quit MODGRID...' onder de optie 'files'.



Figuur 3.7 Voorbeeld van een werkscherm van MODGRID dat gebruikt wordt om de invoer van MODFLOW aan te passen

De eerste taak ('pas invoer MODFLOW aan') wordt verlaten met behulp van de keuze 'klaar'. Vervolgens zal de eerste taak groen gekleurd worden. Als vervolgens een MODFLOW berekening gestart moet worden, moet opnieuw de taak 'pas invoer MODFLOW aan' gestart worden en moet de keuze 'generate MODFLOW input' onder de optie 'files' gekozen worden. Hier moet bij de vraag over de rekenmethode een C van 'confined' ingevoerd worden (het Ketelmeergebied bevat spanningswater).

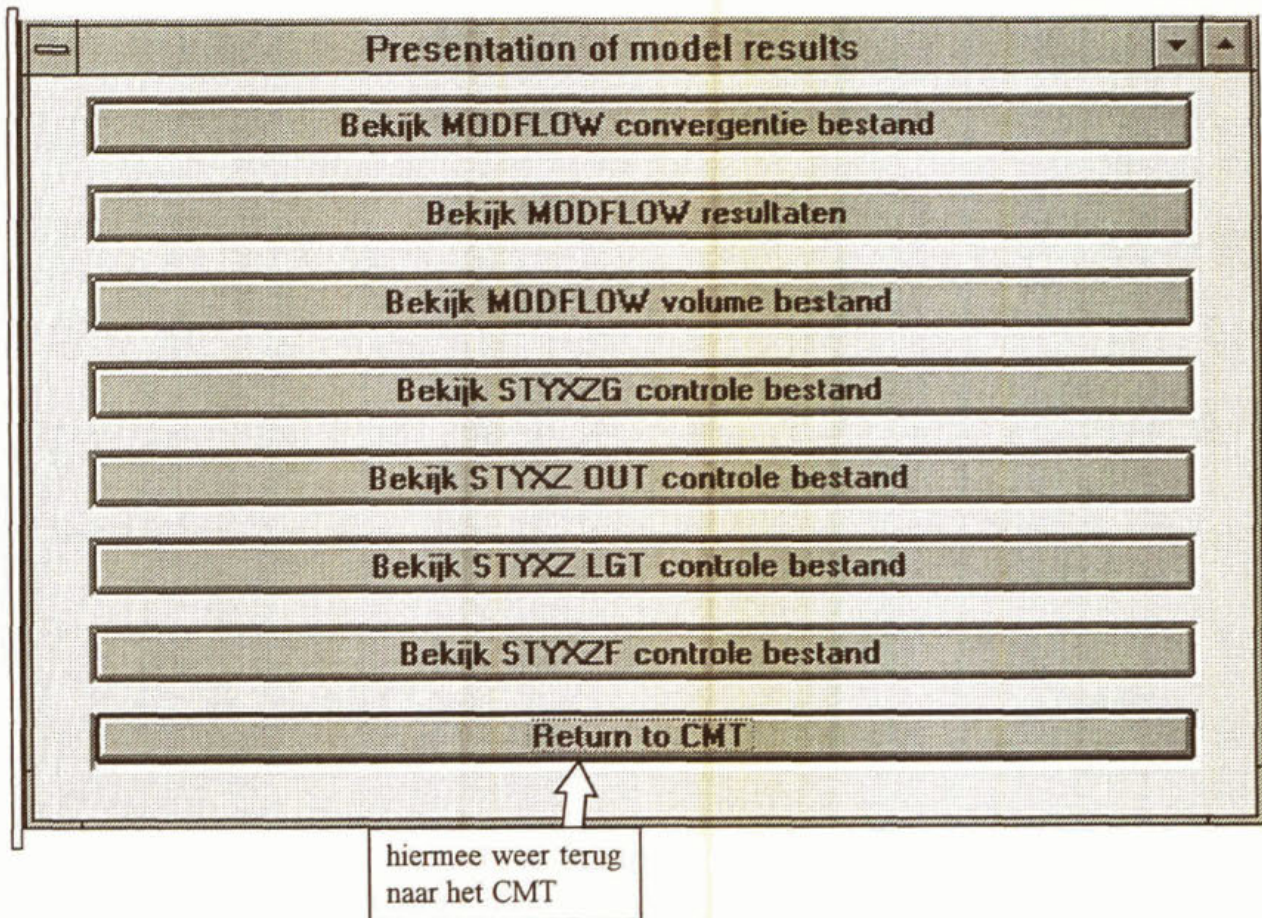
Nadat een geohydrologische model is aangepast en invoer voor MODFLOW is aangemaakt, moeten vaak de convergentie parameters voor MODFLOW aangepast worden, teneinde een goede convergentie te verkrijgen. Deze aanpassing kan met de tweede taak plaatsvinden: 'convergentie paramaters'. Als deze taak wordt gekozen, verschijnt een keuzemenu waarin een aantal parameters gewijzigd kan worden (Figuur 3.8). Bij dit voorbeeld worden de parameters hetzelfde gelaten; de criteria waaraan de waterbalans in dit geval moet voldoen is een verandering van de stijghoogte en de lekkage van minder dan 0.1E-08 m en m³ per iteratieslag. Hierdoor zal MODFLOW in ongeveer 250 stappen tot een voldoende nauwkeurig geohydrologisch model convergeren.



Figuur 3.8 Menu waarin de convergentieparameters van MODFLOW ingesteld worden

De volgende taak is de daadwerkelijke geohydrologische berekening: 'draai MODFLOW'. Als deze taak wordt gekozen zal MODFLOW gestart worden. Op het scherm is te zien in welke iteratiestap het programma zich bevindt. De voorbeeldberekening duurt enkele minuten (op een PENTIUM). Nadat de MODFLOW berekening is afgelopen zal automatisch invoer voor STYXZ aangemaakt worden. Op het scherm verschijnt dan het opkomstscherf van modgrid met de mededeling 'Writing .st1 file...' en 'Writing .st2 file...'. Nadat deze files zijn weggeschreven is de berekening afgelopen en zal ook deze taak groen gekleurd worden.

Als een hydrologische berekening is uitgevoerd kan het zinvol zijn de taak 'bekijk convergentie en controle' op te starten. Als deze taak wordt gestart verschijnt een keuze menu (Figuur 3.9), waarin onder andere de keuzen 'bekijk MODFLOW convergentie bestand' en 'bekijk resultaten MODFLOW berekening' geselecteerd kunnen worden. Alle andere keuzen zijn nu nog gevuld met dummie files. Deze worden pas omgezet in echte files als de bijbehorende taken uitgevoerd zijn.

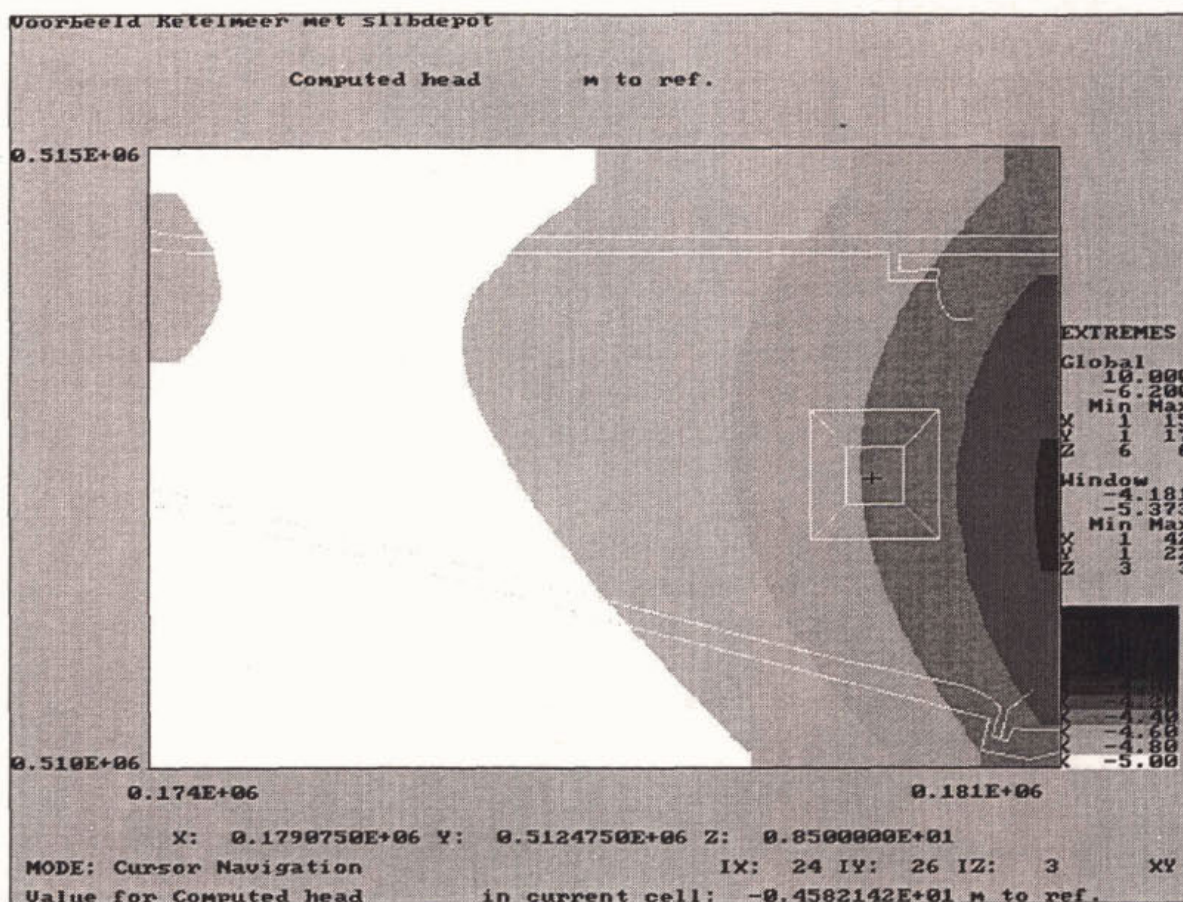


Figuur 3.9 Optiemenu waarin de verschillende controle-files bekeken kunnen worden; als een file nog niet beschikbaar is verschijnt de mededeling 'taak nog niet uitgevoerd'

Als de optie 'bekijk MODFLOW convergentie bestand' wordt geselecteerd, zal het convergentiebestand in een viewer op het scherm getoond worden. Voor een beschrijving van de betekenis van de inhoud van de file wordt naar de MODFLOW handleiding verwezen, omdat deze te uitgebreid is om er hier dieper op in te gaan. Het belangrijkste deel van de file wordt in de volgende alinea toegelicht.

De informatieblokken die van direct belang zijn voor de berekening zijn 'MAXIMUM HEAD CHANGE FOR EACH ITERATION' en 'MAXIMUM WATER BALANCE ERROR FOR EACH ITERATION'. In deze blokken wordt de verandering van de stijghoogte en de waterbalans voor elke iteratiestap getoond. Als het model convergeert (bij elke stap dichterbij een correcte oplossing komt) zal de waarde van deze verandering afnemen in de tijd. In dit geval neemt de waarde van de 'maximum head change' af van 1.538 m/stap in de eerste iteratiestap naar $-0.615 \cdot 10^{-11}$ m/stap in de laatste stap. Bij de 'maximum water balance error' is dit respectievelijk -0.945 m³/stap en $-0.968 \cdot 10^{-9}$ m³/stap. Het model is uiteindelijk geconvergeerd in 283 stappen (er waren maximaal 500 stappen opgegeven). Het model voldoet dan aan het gestelde criterium van een maximale head change en een maximale water balance error van minder dan $0.1E-08$ per iteratiestap. Deze eisen waren bij de convergentieparameters opgegeven. Nadat het convergentiebestand is bestudeerd kan teruggekeerd worden naar het CMT met de keuze 'return to CMT'. De taak 'bekijk convergentie en controle' zal vervolgens ook groen worden.

Bij de optie 'bekijk geohydrologische berekening' wordt MODGRID in de postprocessing mode gestart. Hiermee kunnen de berekeningsresultaten bestudeerd worden. Het is aan te raden deze resultaten zeker te bestuderen voordat met transportberekeningen wordt verder gegaan.



Figuur 3.10 Berekende stijghoogte van modellaag 4 (Z=3), gepresenteerd met MODGRID

Een parameter die zeker bekeken moet worden, is de berekende stijghoogte. Figuur 3.10 geeft hiervan een voorbeeld. Deze kan getoond worden door bij de optie 'data' de keuze 'set actieve parameter' te maken. Vervolgens moet met de pijltjestoetsen de parameter 'computed head' geselecteerd worden. Door een 'd' in te typen wordt deze parameter vervolgens op het scherm getoond. Op dezelfde wijze kunnen andere parameters geselecteerd worden.

Als men tevreden is over de geohydrologische berekeningen kan met de transportberekeningen verder gegaan worden. In principe kan ook met een niet correcte geohydrologische berekening verder gegaan worden, omdat de invoerfiles voor STYXZ door MODFLOW automatisch aangemaakt worden. In de uitvoerfile van STYXZG zal in dat geval echter melding worden gemaakt van een groot aantal fouten in de waterbalans. *Het doorrekenen met een foutieve waterbeweging levert een verkeerd verspreidingspatroon!*

Als men verder gaat met de transportberekening zal de uitvoer van MODFLOW vertaald moeten worden in een stoftransport-file. Dit gebeurt met het programma STYXZG dat gestart wordt bij de taak 'verwerk debiet invoer'. De invoer voor deze taak wordt in de taak 'invoer STYXZG' aangemaakt. Als deze taak wordt aangeklikt, verschijnt het menu dat in figuur 3.11 is weergegeven. In de verschillende onderdelen zijn de volgende parameters opgenomen:

deel 1 Transportparameters

Hier worden de waarden ingevoerd die verband houden met de commando's POROS, DIFFUS, ALFA-L, ALFA-T, FCT en DIFDIS. Voor de gemiddelde porositeit van het systeem is een waarde van 0.35 gebruikt. Deze waarde wordt gebruikt voor de bepaling van het dispersieve transport en hoeft, gezien de grote onzekerheid van de dispersielengten, niet nauwkeurig gespecificeerd te worden. Voor de diffusiecoëfficiënt is een waarde van $0.01 \text{ m}^2/\text{jaar}$ gebruikt. De longitudinale dispersielengte is 1 meter en de transversale 0.01 meter. Er wordt gerekend met het FCT transportschema. Bij het transport van het depot (eigenschapnummer 8 en hoger) naar het watervoerende pakket (eigenschapnummer 7 en lager) wordt de dispersie niet beschouwd (DIFDIS is -8).

deel 2 Opsplitsen lagen voor optimalisatie diffusief transport

In dit menu kan aangegeven worden hoe de laagopdeling van het geohydrologische model verder verfijnd moet worden. Deze verfijning is (meestal) noodzakelijk om het diffusieve transport uit een depot correct te modelleren. In dit geval wordt laag 4 opgesplitst in 4 lagen. Deze zijn 1/20, 4/20, 5/20 en 10/20 van de oorspronkelijke laag (als laag 4 oorspronkelijk 10 meter dik was, is deze na de splitsing opgedeeld in laag 4a (0.5 meter), 4b (2 meter), 4c (2.5 meter) en 4d (5 meter)). Laag 3 wordt opgesplitst in 3 sub lagen die van boven naar beneden respectievelijk 1/10, 4/10 en 5/10 van de oorspronkelijke dikte zijn.

deel 3 Omrekeningsfactor debieten

Bij deze optie kan een factor ingevoerd worden waarmee de debieten uit de geohydrologische berekening vermenigvuldigd moeten worden (CONVDE). Bij MODFLOW wordt in dagen (debiet in m^3/dag) gerekend terwijl bij STYXZ vaak in jaren gerekend wordt (m^3/jaar). Er moet dus een conversiefactor van 365.25 ingevoerd worden (dagen→jaren).

Aanpassen include file

Alle informatie die direct door de gebruiker aangepast moet kunnen worden is in de delen 1 t/m 3 opgenomen. In het laatste menu kunnen zaken ingesteld worden die zelden door een gebruiker aangepast moeten worden. De aanpassingen moeten uitgevoerd worden met een normale editor, zodat erop gelet moet worden dat de juiste formats gebruikt worden. De file die bij deze laatste stap aangepast kan worden wordt hieronder weergegeven.


```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
$include ..\work\styxzgi1.mnu 1 13 0

SPLITHO
$include ..\work\styxzgi2.mnu 1 5
END

$include ..\work\styxzgi3.mnu 1 13 0

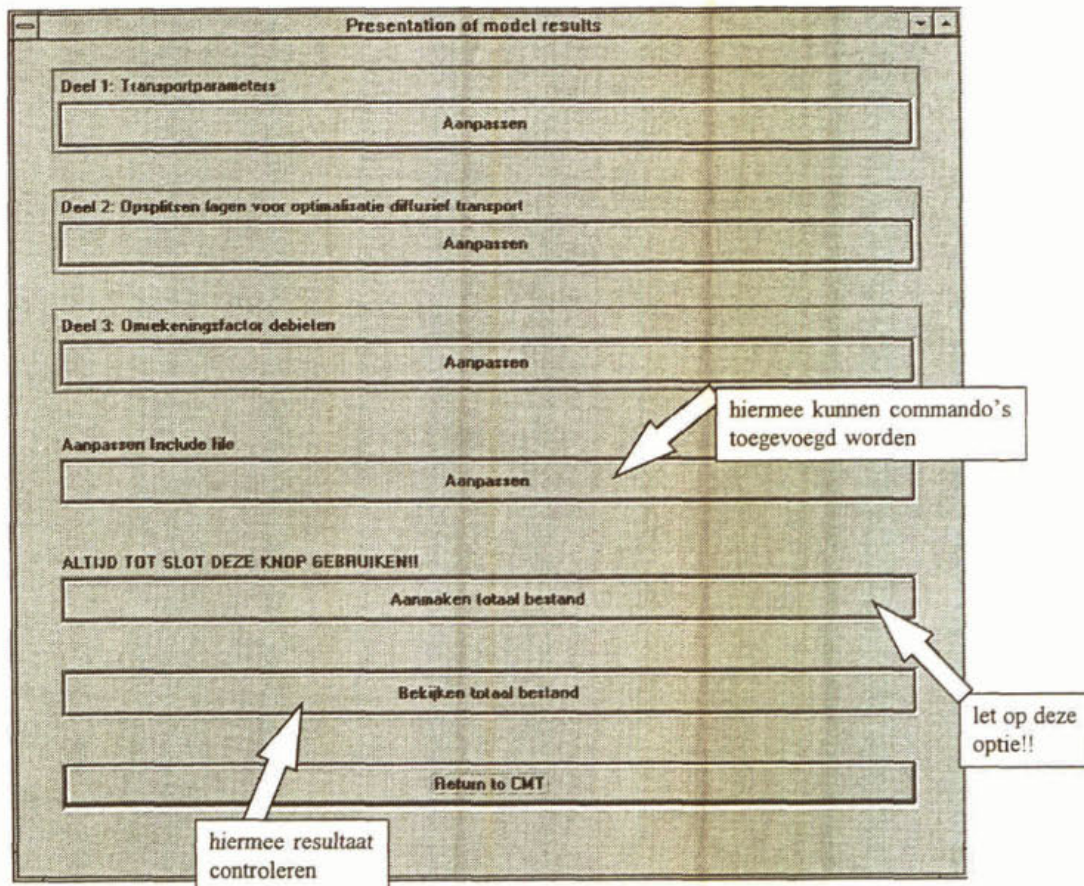
-----
hierboven zeker niets veranderen!!!
hieronder kunnen commando's toegevoegd of aangepast worden
-----
***
geohydrologische invoerfiles met relatieve plaatsaanduiding
achtereenvolgens de volume-file en de debieten-file
***
VOLUME @data.st1
FLOW @data.st2
***
geef een analyse van het transport als uitvoerfile
***
REPORT
***
einde invoerfile (END is verplicht eindcommando)
***
END

-----
alles wat zich onder deze lijn bevindt is niet relevant
en wordt dus niet door STYXZG ingelezen;
-----

```

In het eerste deel van deze file mag dus niets aangepast worden. Indien hierin wijzigingen aangebracht worden zal het CMT verstoord worden. In het tweede deel worden de namen van de geohydrologische files gegeven en wordt een report aangevraagd. De file wordt besloten met een END, hetgeen verplicht is. Voor het commando END kunnen eventueel nog aanvullende commando's voor STYXZG toegevoegd worden. Voor de mogelijkheden wordt naar de handleiding van STYXZ verwezen.

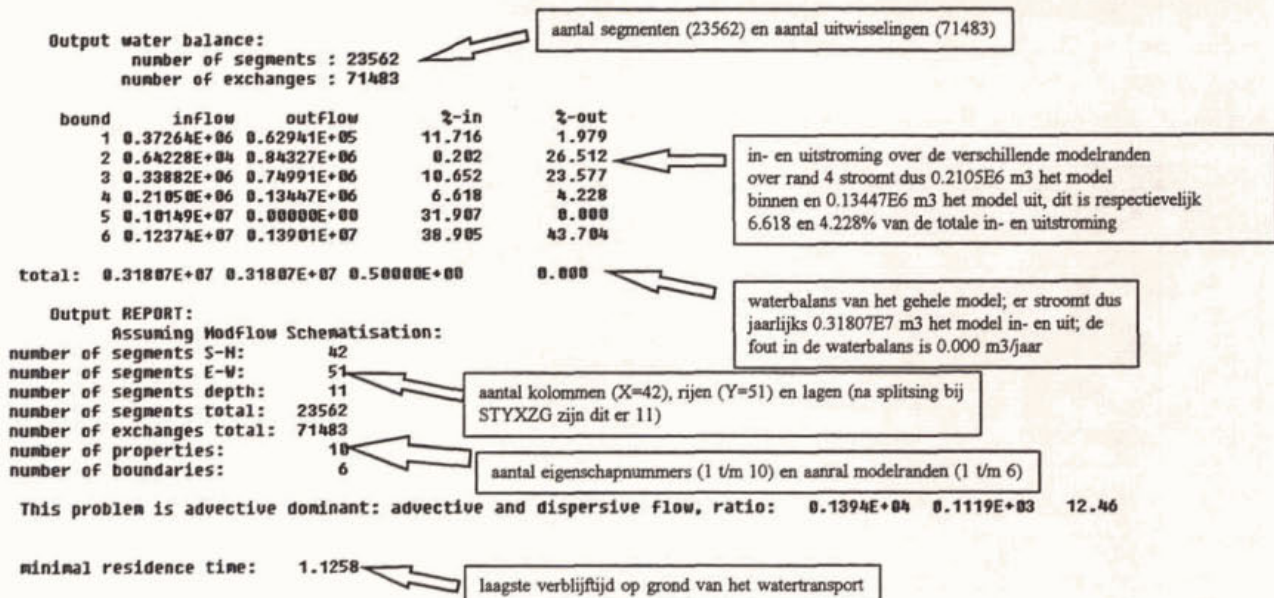
Nadat de invoerfile is aangepast moet deze aangemaakt worden met de optie 'Aanmaken totaal bestand'. Dit moet *altijd* plaatsvinden nadat wijzigingen in de invoer zijn uitgevoerd. Indien gewenst kan de aangemaakte invoer-file bekeken worden met de optie 'Bekijken totaal bestand'. Het menu wordt verlaten met de keuze 'Return to CMT'.



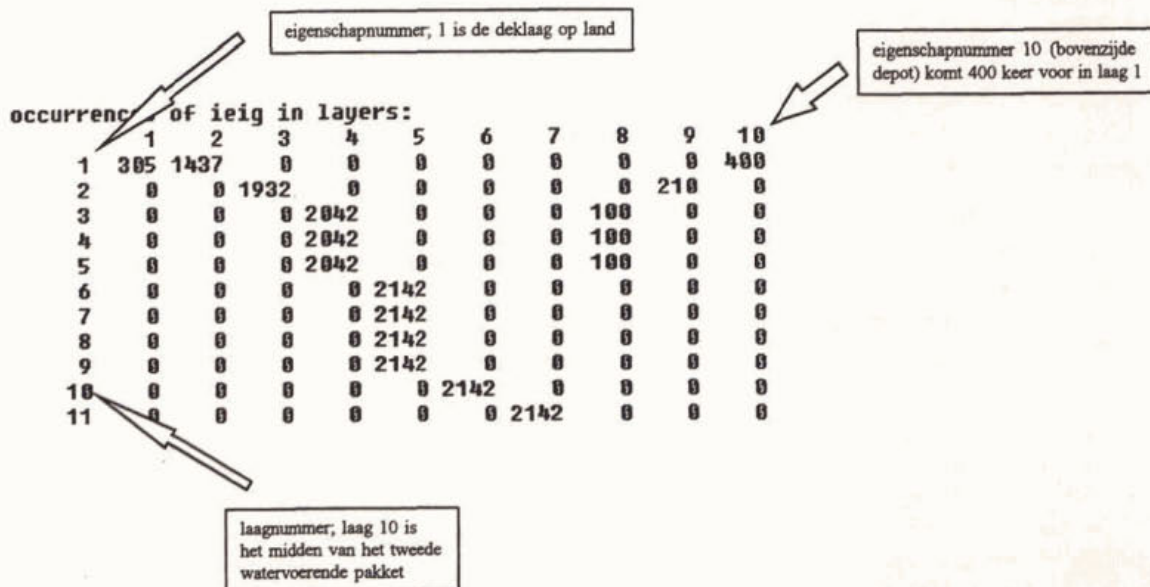
Figuur 3.11 Menu waarmee de invoer van STYXZG aangepast kan worden

Nadat de invoerfile voor STYXZG is aangepast, kan STYXZG met de taak 'verwerk debiet invoer' gedraaid worden. Als dit programma draait, wordt op het scherm getoond in welke stap het programma zich bevindt. In het algemeen zal de uitvoering van STYXZG enkele minuten duren. Nadat STYXZG klaar is met de berekening zal ook deze taak groen gekleurd worden.

Ook door STYXZG wordt een controle file weggeschreven. Deze is te bekijken bij de taak 'bekijk convergentie en controle' en de optie 'bekijk STYXZG controle file'. Figuur 3.12 en Figuur 3.13 geven de belangrijkste onderdelen van deze file. Voor een verdere beschrijving van de informatie uit de file wordt naar de handleiding van STYXZ verwezen.

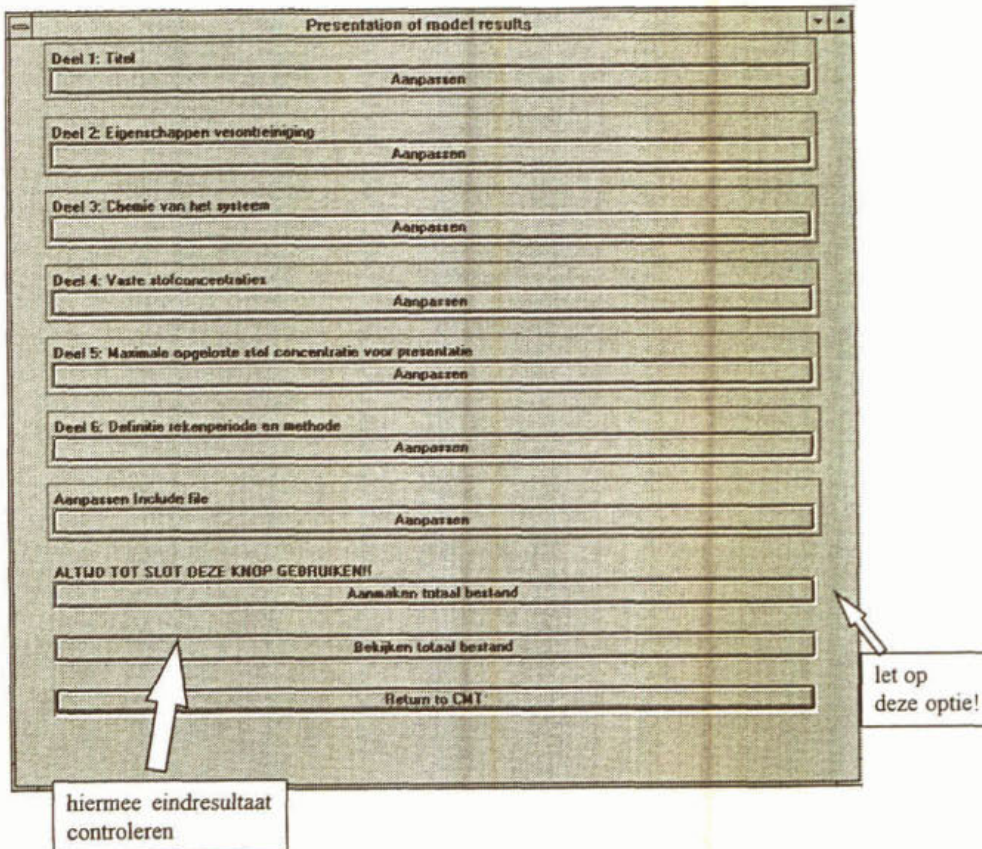


Figuur 3.12 Gedeelte van de uitvoer van STYXZG waarin een analyse wordt gegeven van de ingelezen geohydrologische files



Figuur 3.13 Gedeelte van de uitvoer van STYXZG waarin een analyse wordt gegeven van de opbouw van het transportmodel

Na de bewerking van de transport-files kan de daadwerkelijke transportberekening uitgevoerd worden met STYXZ. Hiertoe moet de taak 'bereken stoftransport' gestart worden. De invoer voor STYXZ kan met de taak 'invoer STYXZ' aangepast worden. In dat geval verschijnt eenzelfde editor als bij de taak 'invoer STYXZG'. Figuur 3.14 toont het keuzemenu.



Figuur 3.14 Menu waarmee de invoer van STYXZ aangepast kan worden

De volgende parameters zijn in dit voorbeeld opgenomen:

- Deel 1: Titel
Hier kan een titel van de berekening ingevoerd worden; het bijhorende STYXZ-commando is 'TITLE'. In dit geval zal de titel van de berekening zijn 'Orpheus 2.0: Voorbeeld 1: Testberekening Ketelmeer met put'.
- Deel 2: Eigenschappen verontreiniging
In dit menu-onderdeel kunnen alle chemische eigenschappen van de verontreiniging ingevoerd worden. Bij NAMPOL kan de naam van de verontreiniging opgegeven worden (DCB), bij VERKOC de verdelingscoëfficiënt ($0.5 \text{ m}^3/\text{kg}$) en bij THALF de halfwaardetijd in jaren. Voor de halfwaardetijd is hier een waarde van 0 jaar ingevoerd hetgeen betekent dat de stof niet wordt afgebroken.

Deel 3: Chemie van het systeem

Bij dit onderdeel kunnen de chemische eigenschappen van de verschillende onderdelen van het systeem opgegeven worden. De gegeven eigenschappen gelden voor alle segmenten in het systeem met dat eigenschapnummer. De informatie die opgegeven moet worden past bij het commando CHEMIS en is achtereenvolgens het eigenschapnummer, de porositeit, het organische stofgehalte en de dichtheid van de vaste fase. In dit geval hebben alle segmenten met een eigenschapnummer van 1 dus een porositeit van 0.35, een organische stofgehalte van 5.0%, een dichtheid van de vaste fase van 2500 kg/m³ en een DOC-gehalte in het porienwater van 25 mg/l (ofwel 0.025 kg/m³). Voor de laagopdeling wordt verder verwezen naar tabel 3.2.

Deel 4: Vaste stofconcentraties

In dit menu wordt de informatie opgegeven die past bij het commando 'SOLPOL'. Dit betreft een aanduiding van de segmenten waarvoor de betreffende concentratie geldt, de waarde van de concentratie in massa/kg en een eventuele factor waarmee het volume van de betreffende segmenten moet worden vermenigvuldigd. Alle segmenten met een eigenschapnummer van 8, 9 en 10 hebben dus een vaste stofconcentratie van 0.802 mgDCB/kg. Dit zijn alle segmenten die in het depot liggen.

Deel 5: Maximale opgeloste stof concentratie voor presentatie

In dit menu moet de maximale porienwaterconcentratie opgegeven worden. Deze waarde wordt bij de presentatie van de berekeningen gebruikt (commando CONMAX). De waarde kan bepaald worden uit de verdelingscoëfficiënt, het organische stofgehalte van de segmenten waarin zich verontreiniging bevindt en de vaste stofconcentratie.

Deel 6: Definitie rekenperiode en methode

Bij dit menu-item moeten alle zaken met betrekking tot de door te rekenen periode en het uitvoerinterval opgegeven worden. Het betreft de STYXZ-commando's TBEGIN, TIME, NPICTU en FCT. In dit geval begint de berekening op t=0. Het is binnen het CMT niet mogelijk een ander begintijdstip te kiezen. Er moet 500 jaar gerekend worden, en er moeten over deze periode 25 plaatjes weggeschreven worden. Er wordt dus elke 20 jaar een plaatje weggeschreven. Er wordt met FCT gerekend.

Aanpassen include file

Bij deze keuze verschijnt de file die hieronder is afgedrukt. Met het bijgevoegde commentaar spreekt de file voor zich. Indien nieuwe commando's toegevoegd moeten worden kan dit aan het eind van de file plaatsvinden.

```
.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
$include ..\work\title.mnu 1 13
$include ..\work\styxz1.mnu 1 13 0
CHEMISTRY
$include ..\work\styxz2.mnu 7 15 25 35 45 55 0
END
SOLPOL
$include ..\work\styxz3.mnu 7 15 25 35 0
END
```



```

$include ..\work\styxxzin4.mnu 1 13 0
CONTTA      4          (niet aanpassen)
$include ..\work\styxxzin5.mnu 1 13 0

```

```

-----
hierboven zeker niets veranderen!!!!
hieronder kunnen commando's toegevoegd of aangepast worden
-----

```

```
***
```

```

doorsneden die tijdens de berekening op het scherm
getoond moeten worden (verwijder GRAPHS t/m END en kies
NOPICT als er geen plaatjes getoond moeten worden

```

```
***
```

```
GRAPHS
```

```

Z 1
Z 2
Z 3
Z 4
Z 5
Z 6
END

```

```
***
```

```

gridtransformatie tussen hydrologische en chemische model
1 is correct bij MODFLOW en bij SFYNKZ (oorsprong linksboven)

```

```
***
```

```
TRANSF
```

```
1
```

```
***
```

```

coördinaten nulpunt (linker bovenhoek kaart)
draaiingshoek ten opzichte van geografische assen (0 graden)

```

```
***
```

```
COORDI
```

```
173500.      515000.
```

```
ANGLE
```

```
0.0
```

```
***
```

```

opbouw grid in X(west-oost)- en Y(noord-zuid)-richting
7 cellen van 500 meter, 2 cellen van 250 meter enz.

```

```
***
```

```
XGRID
```

```

7 500.
2 250.
1 500.
1 250.
2 125.
1 100.
24 50.
2 100.
2 250.

```

```
END
```

```
YGRID
```

```

2 500.
1 250.
1 100.
1 150.
40 50.
2 125.
4 250.

```

```
END
```

```
***
```

```

posities benodigde files, achtereenvolgens
-geografische kaart (is niet zo relevant meer)
-volume file; relatieve plek
-debieten file; ook relatief

```

```
***
```



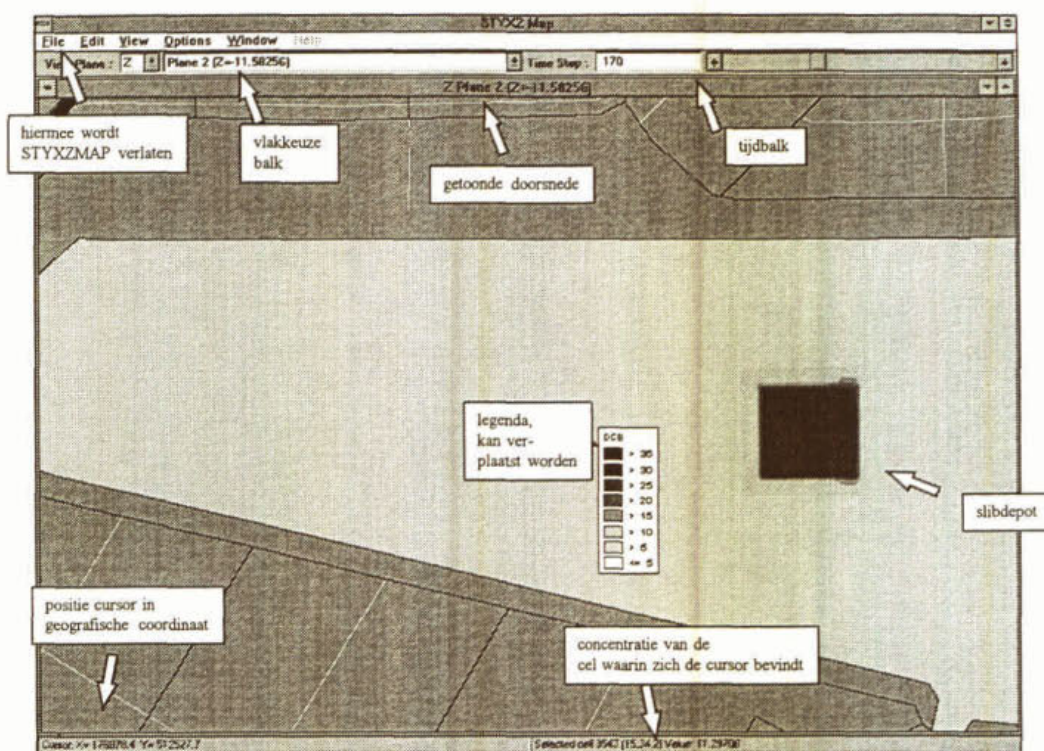
```
MAP      ..\MAPS\KETELMEE\KETEL.DIG
VOLUME  @VOL.UNF
FLOW     @FLOW.UNF
        ***
        verplichte afsluiting met END
        ***
END

-----
alles wat zich na END deze lijn bevindt is niet relevant
en wordt dus niet door STYXZ ingelezen
-----
```

Nadat de invoerfile is aangepast moet deze aangemaakt worden met de optie 'Aanmaken totaal bestand'. Dit moet altijd plaatsvinden nadat wijzigingen in de invoer zijn uitgevoerd. Indien gewenst kan de aangemaakte invoer-file bekeken worden met de optie 'Bekijken totaal bestand'. Het menu wordt verlaten met de keuze 'Return to CMT'.

Nadat de invoer voor STYXZ is aangepast, kan de berekening gestart worden. Deze duurt bij het voorbeeld enkele minuten. Gedurende de berekening wordt op het scherm de berekende verspreiding getoond. Nadat de berekening is uitgevoerd, wordt ook de taak 'bereken stoftransport' groen.

Nadat het stoftransport is berekend kan het resultaat op twee manieren bestudeerd worden: grafisch met het pakket STYXZMAP en analytisch met STYXZP. In het algemeen worden de resultaten eerst grafisch bestudeerd. Hiertoe moet de taak 'bekijk resultaat verspreidingsberekening' gestart worden. Vervolgens wordt STYXZMAP geactiveerd. Voor het gebruik hiervan wordt naar de handleiding verwezen. Figuur 3.15 geeft een voorbeeld van een presentatie. Hier wordt de verspreiding in modellaag 2 weergegeven.

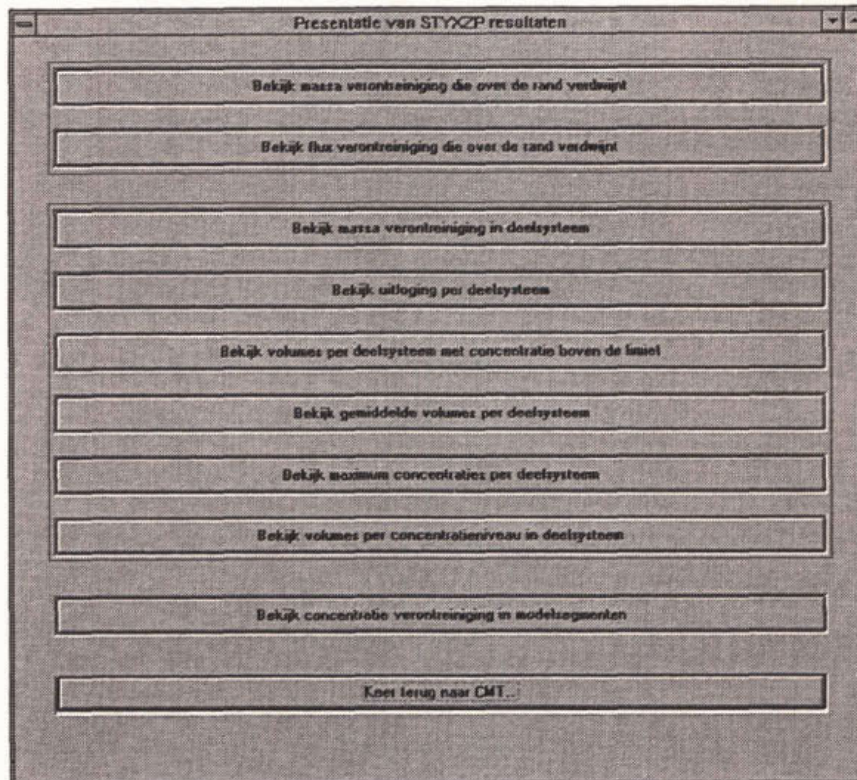


Figuur 3.15 Voorbeeld van een presentatie van de verspreiding uit een depot met STYXZMAP

Een getalsmatige analyse kan met STYXZP plaatsvinden. Hiertoe moet eerst de invoerfile hiervoor aangepast worden met de taak 'maak invoer STYXZP'. Er verschijnt dan een editor waarin een aantal commando's opgegeven kan worden. Bij het voorbeeld worden bijvoorbeeld de volgende commando's gegeven:

HEADER	Na dit commando wordt een titel opgegeven die boven de uitvoerfiles zal worden afgedrukt
PROPER	De analyse die volgt zal betrekking hebben op alle segmenten met de eigenschapnummers 8, 9 en 10: dit zijn de segmenten die in het depot liggen
MASSAB	Met dit commando wordt de absolute massa van de verontreiniging die zich in de segmenten die bij PROPER zijn opgegeven bepaald
LIMIT	Hiermee wordt aangegeven dat de limietconcentratie voor het volgende deel van de analyse 0.01 mg/m ³ zal bedragen
PROPER	De analyse die volgt zal betrekking hebben op alle segmenten met de eigenschapnummers 3, 4, 5, 6 en 7: dit zijn de segmenten die in het eerste en tweede watervoerende pakket liggen (en in de 'scheidende laag').
VOLCON	Voor de segmenten die bij PROPER gegeven zijn, wordt het volume bepaald waarin de concentratie boven de 0.01 mg/m ³ ligt; nu wordt dus in feite het verontreinigde volume van het watervoerende pakket bepaald.

Nadat de invoer voor STYXZP is aangemaakt, kan deze bewaard worden met de optie 'save'. Vervolgens kan de taak 'draai STYXZP' gestart worden. Nu zal het model gedurende enkele minuten bezig zijn met de analyse. Op het scherm wordt getoond welke stap wordt uitgevoerd.



Figuur 3.16 Keuzemenu voor de bestudering van de analyseresultaten

Uiteindelijk kunnen de analyseresultaten bestudeerd worden met de taak 'bekijk analyseresultaten'. Als deze taak gestart wordt, verschijnt het keuzemenu dat in Figuur 3.16 wordt getoond. De verschillende keuzeopties spreken voor zich. Bij dit voorbeeld kunnen de resultaten bij de opties 'bekijk massa verontreiniging in deelsysteem' en 'bekijk volumes per deelsysteem met concentraties boven de limiet' bekeken worden. De resultaten kunnen geprint worden met de print-optie. Ook kunnen de files naar een ander werkgebied weggeschreven worden (Save as.) waarna ze bijvoorbeeld in een spread-sheet ingelezen kunnen worden.

3.4 Beheer scenario's

In de volgende voorbeelden wordt kort aangegeven hoe een scenario aangepast kan worden. De algemene werkwijze hiervoor is:

- klik een 'beheer' optie aan;
- klik de bovenste balk van het keuzemenu aan en selecteer een scenario;
- kopieer dit scenario naar een nieuw scenario met de knop 'kopieer scenario';
- voer een nieuwe omschrijving van het scenario in en geef een directory (de voornaam van deze directory moet bij de consolidatiescenario's gelijk zijn aan 'CONSOLID', bij de speciestenari'o's aan 'SPECIE', bij de oppervlaktwaterkwaliteit aan 'OPPWAT' en bij de geohydrologie aan 'GEOHYDRO'; de extensie mag vrij gekozen worden;
- kies 'begin kopiëren';
- pas nu het scenario aan met de knop 'pas scenario aan', er verschijnt nu een editor of een invoerprogramma waarmee het scenario aangepast kan worden;
- bewaar het scenario en verlaat het 'beheer' menu.

Bij de verschillende keuzemogelijkheden is één-en-ander als volgt uitgewerkt:

Beheer consolidatie scenario's

Bij levering bevat ORPHEUS 2.0 vier verschillende consolidatiescenario's:

- een put van 2 ha, waarbij in 1 jaar 2 meter slib wordt gestort in twee perioden (40000m³);
- een put van 2 ha, waarbij in 5 jaar 10 meter slib wordt gestort in 10 perioden (200000 m³);
- een put van 20 ha, waarbij in 1 jaar 2 meter slib wordt gestort in twee perioden (400000 m³);
- een put van 20 ha, waarbij in 5 jaar 10 meter slib wordt gestort in 10 perioden (2000000 m³).

Als de gebruiker een nieuw consolidatie-scenario aan wil maken, moet eerst een oud scenario gekopieerd worden volgens de methode die hierboven is beschreven. Vervolgens moet de nieuwe consolidatie-file aangepast worden. Als voorbeeld wordt hier aangegeven hoe een depot van 2 ha met 5 jaar een slibstorting van 2 meter per jaar kan worden omgezet in een depot van 16 ha waarin gedurende 3 jaar een slibstorting van 0.5 meter per jaar plaatsvindt (initiële porositeit 0.64 en consolidatiedebiet constant 0.0004 m³/s).

De oorspronkelijke file ziet er als volgt uit:

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
      5
365.00   2.0   .75
730.00   2.0   .75   2.0   .75
1095.00  2.0   .75   2.0   .75   2.0   .75
1460.00  2.0   .75   2.0   .75   2.0   .75   2.0   .75
1825.00  2.0   .75   2.0   .75   2.0   .75   2.0   .75   2.0   .75
      2
150.00000  3.8e-5
9500.00000  3.8e-5
put van 2 ha, 10 meter slib in 5 jaar gestort

```


Beheer oppervlaktewater default waarden

Bij de oppervlaktewaterkwaliteit zijn twee default scenario's opgenomen:

- standaard file oppervlaktewater: 20 ha, 10 meter diep;
- standaard file oppervlaktewater: 50 ha, 20 meter diep;

Deze scenario's verschillen alleen met betrekking tot het oppervlak van de plas en de diepte hiervan. Alle andere parameters zijn hetzelfde gebleven.

De scenario's kunnen in principe met behulp van een editor op de hierboven beschreven wijze aangepast worden. Omdat de opbouw van de invoerfile echter behoorlijk complex is, is besloten deze aanpassing hier verder niet te beschrijven. Het is het handigst om de invoer pas te wijzigen binnen de specielaagmodule, die gestart wordt als het oppervlaktewatermodel wordt geactiveerd. Binnen de specielaagmodule kunnen via interactieve menu's veel gemakkelijker wijzigingen aangebracht worden. De gewijzigde file moet vervolgens als een nieuwe case (dus niet als scenario) opgeslagen worden. Hiertoe moet op de vragen 'wilt u de uitvoer overschrijven' en 'wilt u de uitvoer bewaren' 'ja' geantwoord worden en moet voor de uitvoer de default extensie 'UIT' meegegeven worden.

Beheer MODFLOW schematisatie

Voor de grondwaterberekeningen zijn twee scenario's in ORPHEUS 2.0 opgenomen. Het betreft de volgende twee scenario's:

- voorbeeldberekening zonder put;
- voorbeeldberekening met put.

Beide scenario's zijn een sterk vereenvoudigde weergave van de hydrologie van het Ketelmeergebied.

Als een nieuw scenario moet worden aangemaakt, kan dit op de hierboven beschreven wijze. Bij de keuze 'pas scenario aan' wordt MODGRID opgestart. Vervolgens kan het gekozen geohydrologische model naar wens worden aangepast. Hierbij kunnen ook modellen toegevoegd worden en kan het rekengrid verfijnd worden. Het is aan te raden deze acties bij het schematisatiebeheer uit te voeren en niet binnen het CMT. De aangepaste files moeten dan als een nieuwe case in het CMT ingevoerd worden. Als een geheel nieuw model aan het CMT toegevoegd moet worden kan dit het beste aangemaakt worden buiten het CMT en vervolgens geïmporteerd worden.

4 Hulpmiddelen uit Delft DSS

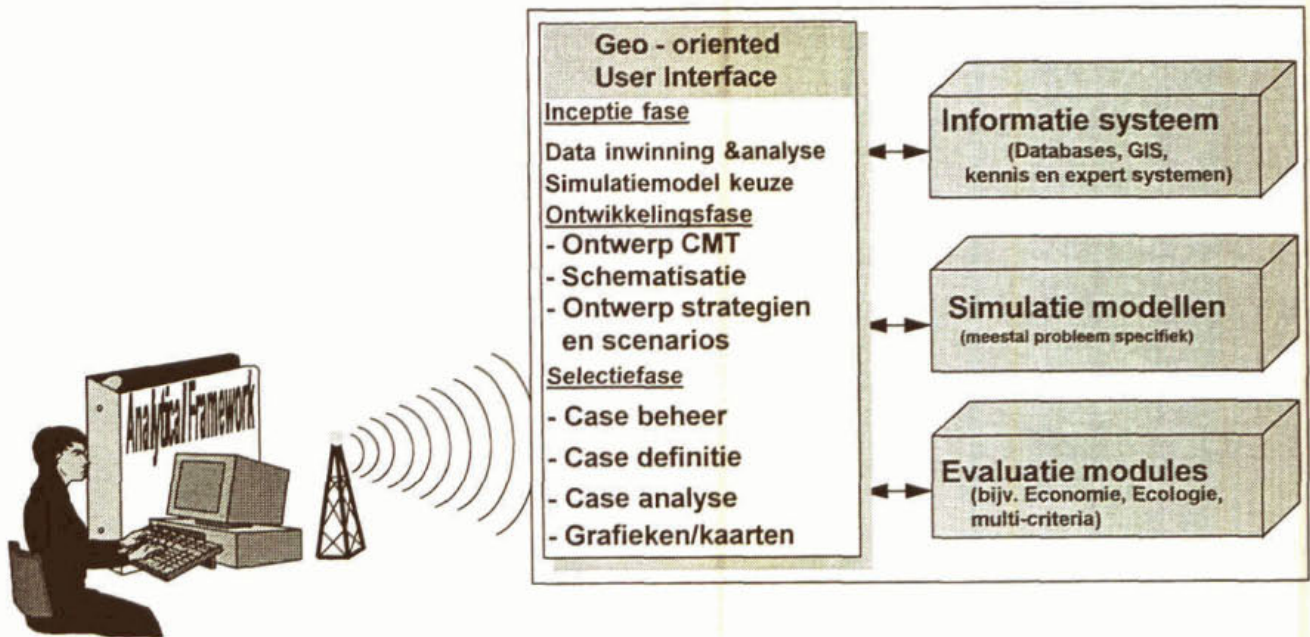
4.1 Delft DSS systeem diagram

Voor ORPHEUS 2.0 is gebruik gemaakt van een aantal in Delft DSS beschikbare hulpprogramma's voor het opbouwen van beslissingsondersteunende systemen. Deze hulpprogramma's zijn niet specifiek voor een bepaald probleem, maar kunnen worden gebruikt in alle gevallen van beslissingsondersteuning op basis van kwantitatieve vergelijkingen. Vandaar dat we spreken van generieke hulpmiddelen voor beslissingsondersteuning. In dit hoofdstuk leert u hoe u deze hulpprogramma's kan gebruiken in ORPHEUS 2.0. De hoofdstukken 5 en 6 zullen u meer vertellen over de simulatiemodellen die ten grondslag liggen aan ORPHEUS 2.0.

U kunt een overzicht vinden van de generieke Delft DSS hulpprogramma's in Figuur 4.1.1. De onderdelen van ORPHEUS 2.0 zijn opgenomen in het generieke schilprogramma van Delft DSS: WL_SHELL.EXE. Het gebruik van dit programma wordt uitgelegd in hoofdstuk 4.2. Vervolgens leert u hoe u de hulpprogramma's ten behoeve van de systeemontwikkeling (ontwikkelingsfase) en de programma's voor de toepassing ten behoeve van de selectie van het juiste alternatief (selectiefase) moet toepassen.

In aanvulling hierop is ook een preprocessor voor het case management tool beschikbaar, CMDESIGN.EXE. Het betreft een prototype van de definitieve versie. Op dit moment is er echter nog geen handleiding voor beschikbaar. Voor het aanmaken van kaarten is er het programma MAPPER. Ook hier is geen Nederlandse handleiding beschikbaar. In MAPPER kunt u echter met behulp van de [F1] toets een Engelstalige hulp oproepen. Beide programma's zijn ter kennismaking in ORPHEUS 2.0 opgenomen. Voor toepassingen op het gebied van riviersystemen zijn nog meer hulpmiddelen beschikbaar (netwerk-schematisatie en belasting-schematisatie hulpmiddelen). Deze zijn echter niet van belang voor ORPHEUS 2.0.

De hulpmiddelen voor de selectiefase hebben de zogenaamde case als basiseenheid. Een case is gedefinieerd als de in- en uitvoerbstanden die bij een verzameling van maatregelen, scenariokeuzes en systeemaannamen horen. Of meer eenvoudig gezegd; een case is alle in- en uitvoer die aangemaakt worden bij het volledig doorrekenen van de simulatiemodellen. Binnen Delft DSS bestaan er het case management tool, het case definition tool en het case analysis tool. In ORPHEUS 2.0 wordt alleen gebruik gemaakt van het case management tool (zie hoofdstuk 4.4). Voor het op een thematische kaart presenteren van de berekeningsresultaten is het programma STYXZMAP ontwikkeld.

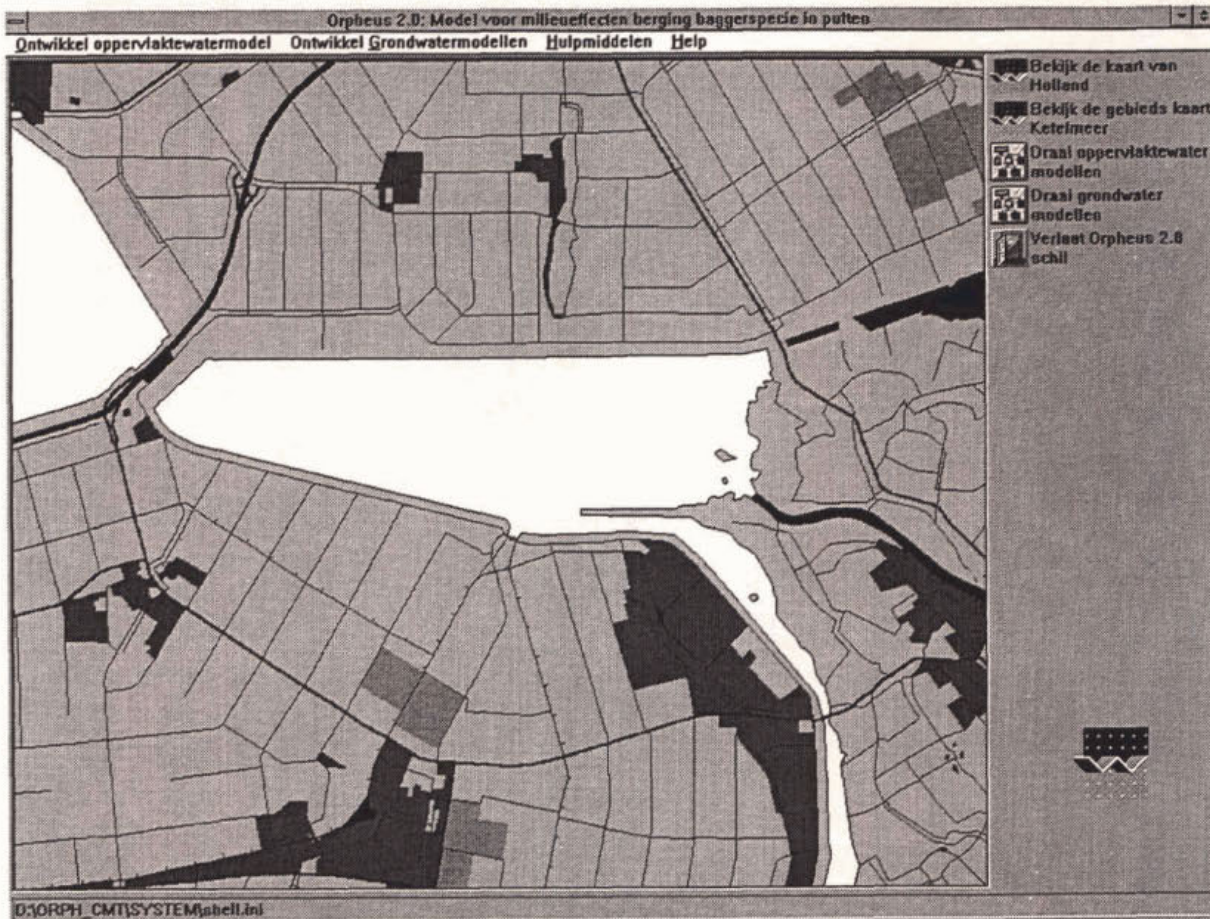


Figuur 4.1.1 Systeendiagram van Delft DSS

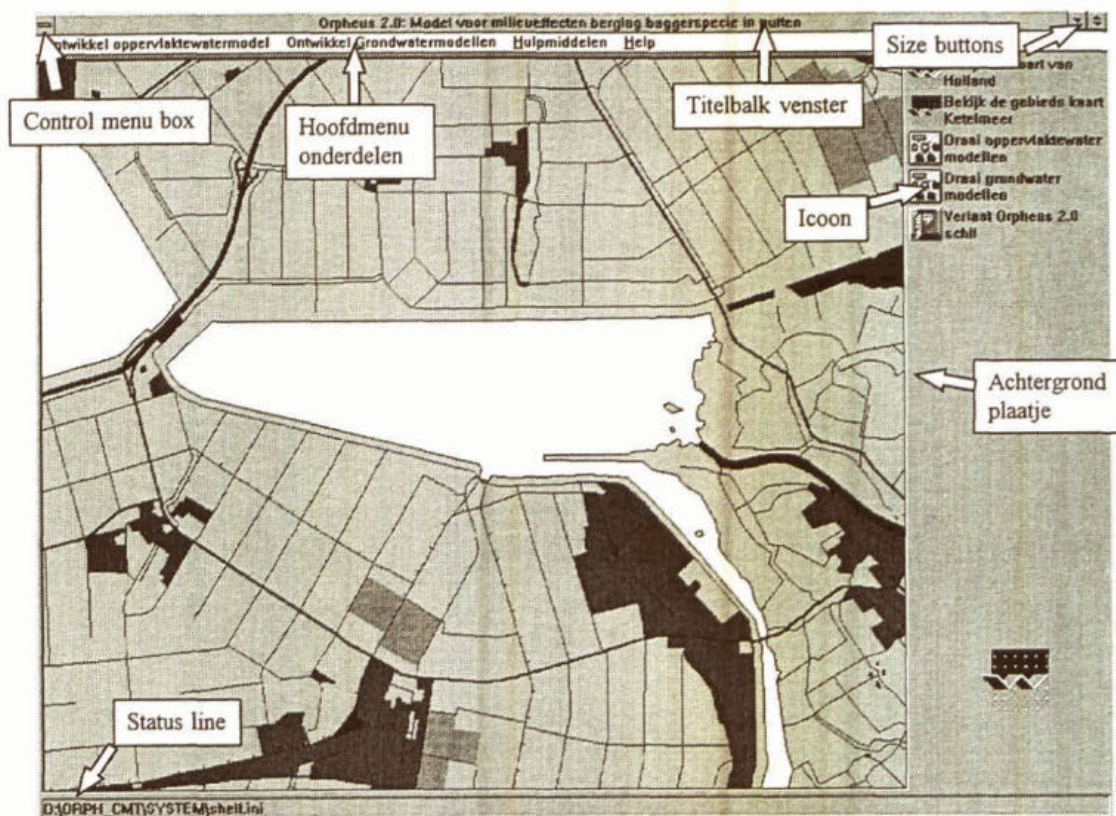
4.2 Het schilprogramma WL_SHELL.EXE

Het doel van WL_SHELL is om als raamwerk te fungeren waarbinnen alle programma-onderdelen van ORPHEUS 2.0 een plaats kunnen vinden. Het programma wordt vooral gebruikt om andere programma's op te kunnen starten en om het scherm zodanig in te delen dat een overzichtelijk geheel ontstaat. Daarbij kan zowel gebruik gemaakt worden van een menustructuur als van iconen. Een belangrijke eigenschap is dat u de instellingen kunt aanpassen, zelfs terwijl het programma draait. Het programma is tweetalig. Hieronder is een beknopte handleiding voor het gebruik van het programma opgenomen. Voor een uitgebreide beschrijving wordt verwezen naar de Engelstalige handleiding in Bijlage A3.

Nadat u het programma hebt gestart door in de PROGRAM MANAGER op het ORPHEUS 2.0 icoon te klikken, ziet het scherm eruit als in Figuur 4.2.1 De schermobjecten worden beschreven in Figuur 4.2.2. De schermobjecten worden meestal geactiveerd door ze met de muis of het toetsenbord te selecteren en te klikken of op [Enter] te drukken. In WL_SHELL zijn er twee soorten schermobjecten die gebruikt kunnen worden voor het draaien van programma's. Dat zijn de menu-onderdelen en de iconen. In het hierna volgende stuk kunt u meer leren over hoe u kunt werken met de verschillende schermobjecten. In het begin is het gebruik ervan wellicht verwarrend. Het aardige van WINDOWS is dat in alle programma's vrijwel dezelfde schermobjecten te vinden zijn, en die kunt u op steeds dezelfde manier gebruiken.



Figuren 4.2.1 Opkomstscherf WL-schil



Figuren 4.2.2 Schermobjecten van het CMT

4.2.1 Werken met de schermobjecten van WL_SHELL

N.B. Bij gebrek aan goede vertalingen voor de scherm-objecten is hier deels gebruik gemaakt van de originele Engelse termen. Ze worden toegelicht in figuur 4.2.2.

Control menu box:

Als u op dit object klikt dan verschijnt een menu. Het menu bevat commando's waarmee u het venster kunt manipuleren. Met de muis of het toetsenbord kunt u vervolgens een menu-onderdeel activeren. Het menu verschijnt ook als het programma is geminimaliseerd tot icoon en u klikt op het icoon.

Size Buttons:

Voor het veranderen van de grootte van het venster zijn er drie typen knoppen, waarvan er altijd maar twee getoond worden. Door erop te klikken kunt u het volgende bereiken:

- Minimaliseer knop (pijlje naar beneden): venster te minimaliseren tot een icoon
- Maximaliseer knop (pijlje naar boven): venster net zo groot als het scherm
- Normaal knop (twee pijltjes): venster op normale grootte

Titelbalk Venster:

De titelbalk van het programma. Deze titel wordt gespecificeerd in het SHELL.INI bestand. U kunt de positie van het venster wijzigen door de titelbalk met de muis te slepen.

Hoofdmenu onderdelen:

De onderdelen van het hoofdmenu worden opgegeven in het bestand SHELL.INI. Je kunt een menu onderdeel activeren door er met de muis op te klikken of met behulp van het toetsenbord (pijltoetsen) te selecteren en op [Enter] te drukken. Vaak kan een menu onderdeel ook worden geactiveerd met behulp van speciale toetsencombinaties. Die beginnen altijd met de [Alt] of [Ctrl] toets. Zo'n toetsencombinatie wordt in het menu zichtbaar gemaakt door het onderstrepen van een letter die in combinatie met de [Alt] kan worden gebruikt. Zo kan een menu onderdeel "Dxxx" worden geactiveerd met behulp van de [Alt]+[D] combinatie. Als het een hoofdmenu onderdeel betreft zal er vervolgens een submenu verschijnen. Met behulp van een submenu onderdeel kunt u het programma starten dat is opgegeven in het bestand SHELL.INI.

Icoon:

Een pictogram met een naam eronder waarmee een programma kan worden gestart.

Achtergrondplaatje:

Het is mogelijk een achtergrondplaatje te specificeren in het SHELL.INI bestand. Het kan een WINDOWS metafile (*.wmf) of een bitmap (*.bmp) zijn. Met het achtergrondplaatje is geen interactie mogelijk.

Status line:

In het kader onderin het WL_SHELL venster is vaak een regel met commentaar te zien. Hierin wordt informatie getoond over de laatste handeling die u heeft uitgevoerd. Als u een programma heeft gestart, kunt u zo zien wat de bijbehorende commandoregel is.

4.3 De algemene model invoer editor MIE.EXE

De algemene model invoer editor MIE is bij een aantal modellen opgenomen. De werking van deze editor spreekt bijna voor zich. Nadat de editor is geactiveerd door een menu-item te kiezen verschijnt een edit-menu. Hierin kunnen met behulp van de muis parameters geselecteerd worden, die vervolgens kunnen worden aangepast. Onder het menu wordt eventueel aangegeven tussen welke minimale en maximale waarde de parameter ligt. Nadat de parameter is ingesteld moet de aanpassing opgeslagen worden door bij het item 'bestand' de optie 'bewaars huidig menu bestand' te kiezen. *De optie 'bewaars als..' moet nooit gekozen worden!* Nadat de wijzigingen zijn opgeslagen wordt de editor verlaten met de keuze 'exit' bij de optie 'bestand'.

4.4 Case Management Tool CMT

4.4.1 Introductie

In dit hoofdstuk zult u leren hoe u met het case management tool (CMT) kunt werken. Dit hoofdstuk is de beknopte gebruikershandleiding van het case management tool. Voor technische achtergrondinformatie omtrent het opzetten van een case management tool applicatie kunt u terecht in Bijlage A4.

In toepassingen van geïntegreerde systemen is het gebruikelijk om de resultaten van meerdere rekengevallen met elkaar te vergelijken. Voor dat doel worden dan een aantal berekeningen gedaan met verschillende invoergegevens. Voor de gemiddelde gebruiker is het heel makkelijk om te vergeten waar de resultaten allemaal zijn opgeslagen, zeker in die gevallen waar een groot aantal parameters of randvoorwaarden kunnen worden gebruikt. Als het modelsysteem erg gecompliceerd is, dan loopt de argeloze gebruiker bovendien het risico om een model te draaien voordat alle invoer is aangemaakt door de ervoor horende modellen. Om het bestandsbeheer en de organisatie van het modelsysteem te vergemakkelijken is het case management tool ontwikkeld.

Meestal wordt het case management tool gebruikt in de selectiefase van beslissingsprocessen. Het doel is dan om u in staat te stellen om te analyseren wat het effect is van mogelijke maatregelen en om een gevoel te ontwikkelen voor het gedrag van het gemodelleerde systeem. Omdat het speel- en leereffect erg belangrijk is, ligt in het case management tool de nadruk op een gemakkelijke selectie van mogelijke maatregelen, gevolgd door een "druk op de knop" benadering voor het draaien van simulatiemodellen. De gebruikersinteractie van het case management tool is zodanig dat het je helpt om de simulatie in de juiste volgorde uit te voeren. De administratie van de bestanden gebeurt geheel achter de schermen, zodat u als gebruiker niet hoeft te onthouden waar alles is gebeven. Het case management tool heeft de zogenaamde *case* als basiseenheid. Een case is gedefinieerd als de in- en uitvoerbestanden die bij een verzameling van maatregelen, scenariokeuzes en systeemaannamen horen. Of meer eenvoudig gezegd een case is alle in- en uitvoer die aangemaakt worden bij het volledig doorrekenen van de simulatiemodellen. Een modelsysteem dat is opgenomen in het case management tool wordt een applicatie genoemd. De onderdelen van het modelsysteem worden taken genoemd. De taken worden zichtbaar gemaakt in blokjes. Een taak kan bestaan uit één of meerdere programma's. De volgorde van de taken wordt aangegeven met pijlen.

De executable van het case management tool is CASEMAN.EXE. Het is een Microsoft WINDOWS 3.1 programma. Het is geschreven in C met behulp van de XVT Portability Toolkit. Er is ook een versie beschikbaar die draait op UNIX workstations. Het programma is tweetalig. Voor dat doel is in het CAPTIONS.LNG bestand voor alle boodschappen van het case management tool een beschrijving in twee talen beschikbaar.

Het case management tool bestaat uit één hoofdvenster met een hoofdmenu met vier onderdelen. Met behulp van de menu onderdelen kunt u de cases van de applicatie beheren (zie Figuur 4.4.1.). U kunt bestaande cases verwijderen of laden en daarna opslaan of verlaten. Nadat u een case heeft geladen, kunt ermee gaan werken. U moet een case beschouwen als een soort document, waar u aan kunt werken. Het hoofdvenster geeft via kleuren aan wat de status is van de verschillende onderdelen van het modelsysteem. Een rood blokje betekent dat niet alle invoer beschikbaar is, zodat de taak nog niet kan beginnen. Groen betekent dat de taak klaar is en dat uitvoer ervan beschikbaar is voor de volgende taken. Een paars blokje betekent dat de taak aan het draaien is, zodat de taak niet nogmaals mag starten. Geel tenslotte betekent dat de taak gereed is om gedraaid te worden.

Het case management tool wordt (meestal) gestart via een icoon vanuit de schil WL_SHELL.EXE. In de volgende paragraaf kunt u lezen hoe u kunt werken met de verschillende schermonderdelen van het case management tool.

4.4.2 Werken met de schermobjecten van het CMT

Nadat het case management tool is gestart zal het scherm eruit zien als in de Figuren 4.4.1 en 4.4.2. In het venster is een aantal schermobjecten dat u kunt manipuleren. De schermobjecten worden meestal geactiveerd door ze met de muis of het toetsenbord te selecteren en te klikken of op [Enter] te drukken. De beschrijving van de schermobjecten is als volgt:

N.B. Bij gebrek aan goede vertalingen voor de schermobjecten is hier deels gebruik gemaakt van de originele Engelse termen.

Control menu box:

Als u op dit object klikt dan verschijnt een menu. Het menu bevat commando's waarmee u het venster kunt manipuleren. Met de muis of het toetsenbord kunt u vervolgens een menu onderdeel activeren. Het menu verschijnt ook als het programma is geminimaliseerd tot icoon en u klikt op het icoon.

Size Buttons:

Voor het veranderen van de grootte van het venster zijn er drie typen knoppen, waarvan er altijd maar twee getoond worden. Door erop te klikken kunt u het volgende bereiken:

- | | |
|--|--|
| - Minimaliseer knop (pijlje naar beneden): | venster te minimaliseren tot een icoon |
| - Maximaliseer knop (pijlje naar boven): | venster net zo groot als het scherm |
| - Normaal knop (twee pijltjes): | venster op normale grootte |

Titelbalk Venster:

De titelbalk van het programma. Deze titel wordt gespecificeerd in het SHELL.INI bestand. U kunt de positie van het venster wijzigen door de titelbalk met de muis te slepen.

Hoofdmenu onderdelen:

De onderdelen van het hoofdmenu zijn Rekengeval, Sessie, Taak en Taal. Het Rekengeval menu stelt u in staat om cases te verwijderen, laden, op te slaan en te verlaten. Het Sessie menu stelt u in staat om de meldingen van het case management tool te bekijken. Het Taak menu stelt u in staat om de eventuele meldingen van de laatst gebruikte taak te bekijken en het Taal menu stelt u in staat om van taal te wisselen. U kunt een menu onderdeel activeren door er met de muis op te klikken of met behulp van het toetsenbord (pijljestoetsen) te selecteren en op [Enter] te drukken. Vaak kan een menu- onderdeel ook worden geactiveerd met behulp van speciale toetsencombinaties. Die beginnen altijd met de [Alt] of [Ctrl] toets. Zo'n toetsencombinatie wordt in het menu zichtbaar gemaakt door het onderstrepen van een letter die in combinatie met de [Alt] kan worden gebruikt. Zo kan een menu onderdeel "Dxxx" worden geactiveerd met behulp van de [Alt]+[D] combinatie. Als het een hoofdmenu-onderdeel betreft zal er vervolgens een submenu verschijnen. De submenu's worden beschreven in paragraaf 4.4.3.

Dropdown List Box met cases:

Bevat een overzicht van de beschikbare cases. Door op het pijltje naast de dropdown list box te drukken kunt u een lijst zichtbaar maken. Met behulp van klikken met de muis of met de pijljestoetsen en de [Enter] toets kunt u een case laden. U kunt direct zien dat een case nog niet geladen is, want dan zijn blokjes grijs. In dat geval kunt u de case die in de dropdown list box wordt getoond ook laden via het Case Management menu.

Taakblokje:

De simulatiemodellen in het case management tool zijn opgedeeld in taken. Elke taak heeft een taakblokje op het hoofdvenster. Door dubbel te klikken kunt u een taak starten. Dit geldt overigens alleen als de kleur van het blokje geel (invoer staat klaar) of groen (uitvoer is gereed) is. Het kan niet als het blokje rood (niet alle invoer klaar), paars (de taak draait al) of grijs (de case is niet geladen) is.

Achtergrondspaatje:

Het is mogelijk om achtergrondspaatje te specificeren in het CMT.INI bestand. Het kan alleen een WINDOWS bitmap (*.bmp) zijn. Met het achtergrondspaatje is geen interactie mogelijk.

4.4.3 Menu-opties in het case management tool programma

Het hoofdmenu bevat de volgende menu items:

- Reken geval
- Sessie
- Taak
- Taal

De submenu's die onder het hoofdmenu zitten, worden hieronder beschreven.

Rekengeval

Het Rekengeval hoofdmenu heeft een submenu met de volgende onderdelen:

Laadt rekengeval:	Deze knop is op het ogenblik niet functioneel. Een case wordt met de dropdown listbox geselecteerd, door de gewenste case aan te klikken.
Bewaar:	Voor het opslaan van een case met dezelfde naam. De wijzigingen worden opgeslagen.
Bewaar als...:	Voor het opslaan van een case met een nieuwe naam.
Verlaat:	Om een case te verlaten, zonder de wijzigingen op te slaan.
Verwijder:	Voor het verwijderen van een case.
Wijzig beschrijving:	Voor het bekijken en aanpassen van een beschrijving van de case (kan alleen aangepast worden als de case is geladen).
Definieer batch:	Om taken te markeren die in batch mode moeten worden gedraaid; er kan alleen van de batch mode gebruik gemaakt worden als er nog <i>geen</i> case is geselecteerd!.
Beëindigen:	Om het case management tool te verlaten

Noot: Dit menu wordt beïnvloed door de status van de case (wel of niet geladen en gewijzigd). Hierdoor kunnen enkele menu-opties af en toe alleen grijs zijn.

Sessie

Dit menu heeft betrekking op de meldingen die het case management tool genereert bij het beheren van de case en het draaien van de taken. Het Session hoofdmenu heeft een submenu met de volgende onderdelen:

Laat logging zien:	Bekijken van de case management tool mededelingen.
Druk logging af:	Afdrukken van de case management tool mededelingen
Verwijder logging:	Verwijderen van de case management tool mededelingen

Taak

Dit menu heeft betrekking op de mededelingen die de taken van het case management tool zelf genereren. Deze worden opgeslagen in een *.LOG bestand. Als een taak bijvoorbeeld STYXZ heet dan zal het bestand met mededelingen STYXZ.LOG heten. De getoonde mededelingen zijn altijd van de geselecteerde taak. Om de mededelingen van andere taken te bekijken, moeten die eerst worden geselecteerd door met de muis te klikken.

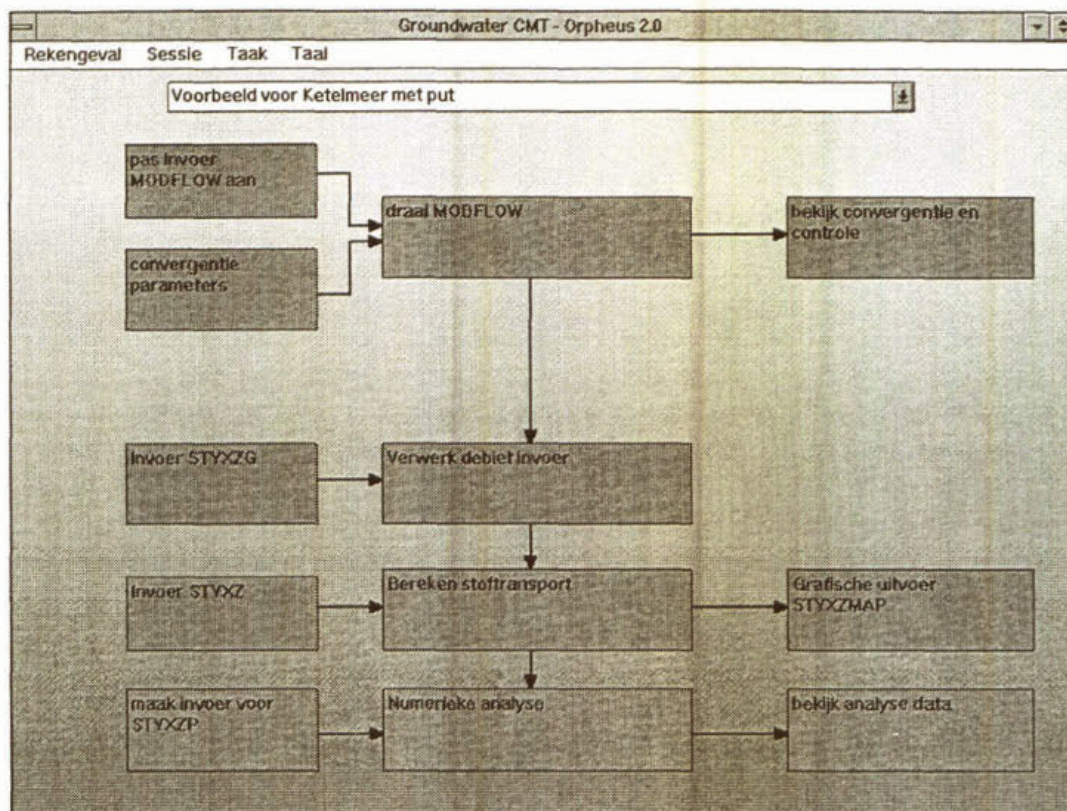
Het Case Work hoofdmenu heeft een submenu met de volgende onderdelen:

Bekijk Task Logging:	Bekijken van de mededelingen van de geselecteerde taak.
Druk Task Logging af:	Afdrukken van de mededelingen van de geselecteerde taak

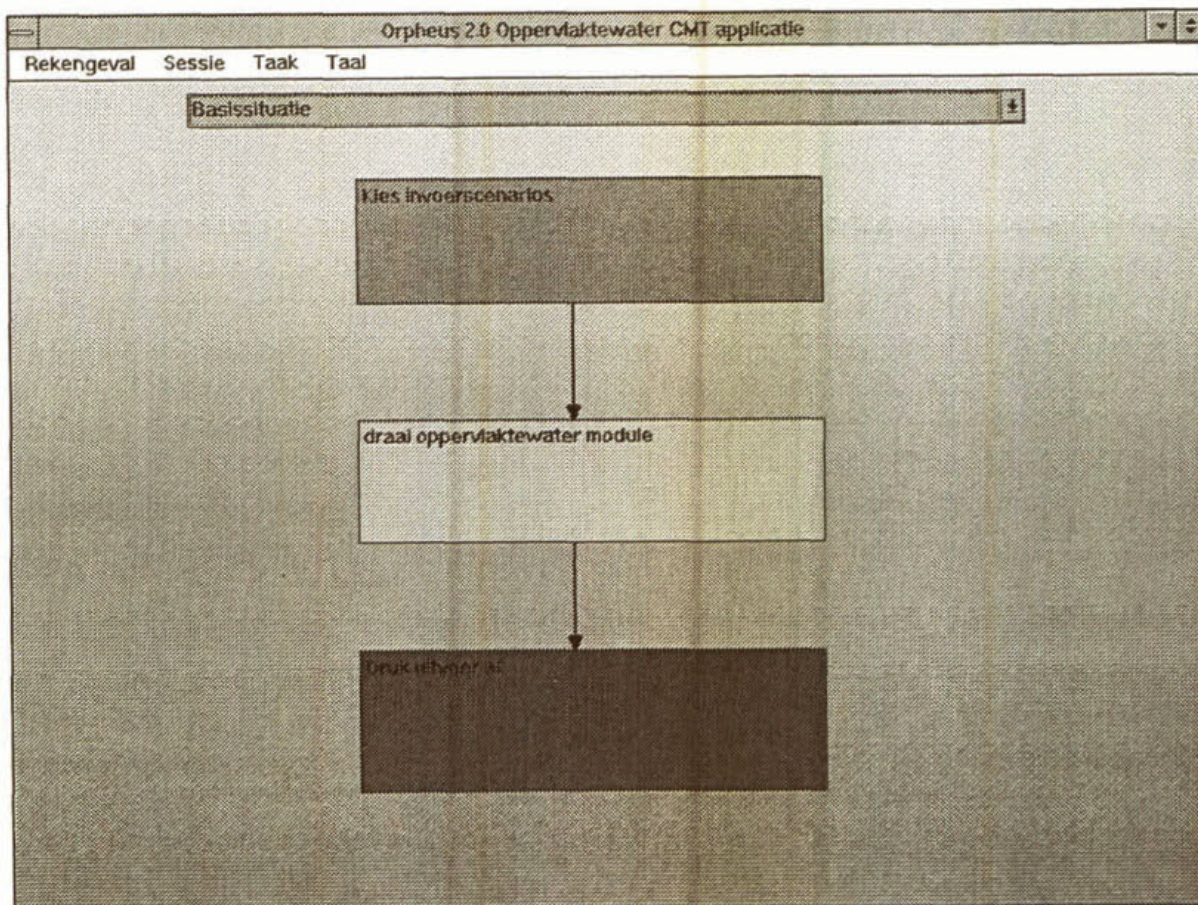
Noot: Alleen als een case is geladen wordt het menu actief en kan een taak geselecteerd worden.

Taal

Het Taal main menu kunt u gebruiken om van taal te verwisselen. Dit kan op elk gewenst moment tijdens het draaien van het programma. Door een taal in het submenu te selecteren zal de betreffende taal gebruikt worden door het case management tool.



Figuur 4.4.1 CMT Grondwater



Figuur 4.4.2 Hoofdvenster CMT oppervlaktewater

5 Opbouw systeem

5.1 Overzicht

Het CMT-ORPHEUS bestaat uit twee reken-gedeelten: het oppervlaktewaterdeel en het grondwater deel. Beide delen zijn onafhankelijk en kunnen los van elkaar gebruikt worden. Het oppervlaktewaterdeel bevat de oppervlaktewatermodule van het oude ORPHEUS en wordt gebruikt bij de bestudering van de effecten van speciestortingen op de oppervlaktewaterkwaliteit. Het grondwaterdeel bevat het modellensysteem MODFLOW-MODGRID-STYXZ en kan gebruikt worden voor zowel de kwantitatieve (stroming) als de kwalitatieve (transport) grondwaterberekeningen. Een volledig overzicht van het CMT-ORPHEUS met de bijbehorende taken wordt in het volgende overzicht gegeven.

Tabel 5.1 Overzicht van de opbouw van het CMT-ORPHEUS en van de taken van de verschillende onderdelen

CMT-ORPHEUS		
oppervlaktewatermodel	oppervlaktewatermodel	berekening oppervlaktewaterkwaliteit
grondwatermodel	MODGRID preprocessing	aanmaak invoer grondwaterstromingsmodel
	MODFLOW	grondwaterstromingsmodel
	MODGRID postprocessing	verwerking resultaten grondwater-stromingsmodel
	STYXZG	vertaling grondwaterstromingsveld naar transportmodel
	STYXZ	bepaling verspreiding stoffen in het grondwater
	STYXZMAP	geografische visualisatie verspreiding stof
	STYXZP	getalsmatige analyse verspreiding stof

De verschillende onderdelen worden in dit hoofdstuk kort beschreven. Voor aanwijzingen met betrekking tot het gebruik ervan wordt naar het volgende hoofdstuk verwezen (hoofdstuk 6). Voor een uitvoerige beschrijving van de verschillende programma's wordt naar de afzonderlijke handleidingen verwezen.

5.2 Oppervlaktewatermodel

Het oppervlaktewatermodel is letterlijk overgenomen uit het oude ORPHEUS. Voor een uitvoerige documentatie hiervan wordt dan ook naar de documentatie van het oude ORPHEUS verwezen (handleiding ORPHEUS²; verslag onderzoek ORPHEUS³; gegevens-inventarisatie ORPHEUS⁴). In de handleiding van het nieuwe ORPHEUS wordt daarom slechts kort op het oppervlaktewatermodel ingegaan.

Het oppervlaktewatermodel berekent de kwaliteit van het oppervlaktewater in een zandwinput waarin speciestortingen hebben plaatsgevonden. De zandwinput wordt hiertoe geschematiseerd als een bak water, die indien dat noodzakelijk is opgedeeld kan worden in een epilimnion (bovenlaag) en een hypolimnion (onderlaag). Ook uitwisselingen met andere wateren kunnen in het model aangebracht worden.

²ORPHEUS handleiding; WL 1989 (T0032)

³ORPHEUS verslag onderzoek; WL 1989 (T0032)

⁴ORPHEUS gegevensinventarisatie; WL 1989 (T0032)

Vervolgens wordt het stortingsproces gedefinieerd in hoeveelheden slib per tijd en in een speciekwaliteit. Hierbij kan een aantal zware metalen en een aantal organische verontreinigingen beschouwd worden. Bovendien kan een aantal parameters zoals het temperatuurverloop, adsorptieconstanten, afbraak, resuspensieparameters en dergelijke ingesteld worden.

Het model berekent het verloop van de kwaliteit van het oppervlaktewater in de tijd. Hierbij worden alle relevante processen beschouwd (oxidatie/reductie, stratificatie, diffusie/dispersie, resuspensie, adsorptie/desorptie, enz). De resultaten kunnen in de vorm van figuren bestudeerd worden en kunnen als data uitgevoerd worden.

In de originele opzet was het oppervlaktewatermodel gekoppeld aan een consolidatiemodel en een specielaagmodel. Met het consolidatiemodel werd de consolidatieflux uit de specie naar het oppervlaktewatermodel bepaald. Met het specielaagmodel werd de kwaliteit van het poriënwater in de specie bepaald. De resultaten van beide modellen werden automatisch aan het oppervlaktewatermodel doorgegeven. Omdat het consolidatiemodel vaak verkeerde resultaten blijkt te geven, is dit model uit ORPHEUS verwijderd. Ook het specielaagmodel is verwijderd, omdat de resultaten van dit model eenvoudig met de hand zijn te berekenen. De informatie die beide modellen aan het oppervlaktewatermodel doorgaven moeten nu handmatig ingevoerd worden.

5.3 Grondwatermodel

5.3.1 MODGRID pre/post

MODGRID is een computerprogramma ter ondersteuning van de ingewikkelde taak van het modelleren van grondwaterstroming met numerieke modellen. Het is in het bijzonder geschikt voor numerieke modellen die zijn gebaseerd op de eindige differentiemethode, zoals MODFLOW. Het is een instrument voor het opzetten, bewerken en calibreren van dergelijke modellen, waarbij interactiviteit, visuele presentatie en analyse een centrale rol spelen. Het programma werkt onder een eigen grafische schil, waarbij de menu-items via een keuzebalk geselecteerd kunnen worden.

MODGRID wordt in alle fasen van de grondwaterkwantiteitsmodellering toegepast:

- afleiden van de ruimtelijke discretisatie van het te modelleren onderzoeksgebied;
- vertaling van beschikbare (veld-)gegevens in termen van modelparameters;
- presentatie en analyse van invoergegevens en berekeningsresultaten;
- aanpassing van parameterwaarden ter calibratie of voor het simuleren van alternatieve beheersmaatregelen;
- produktie van een discreet, massabehoudend stromingsveld te gebruiken voor massa-transportsimulaties gebaseerd op de eindige volume-methode;
- afleiden van modelschematisaties voor gedetailleerde, lokale modellen uit globale, regionale modellen.

Ten behoeve van ORPHEUS is MODGRID, dat normaal als één versie wordt toegepast, gesplitst in een pre- en een postprocessing gedeelte. Het pre-processing gedeelte bevat de meest uitgebreide functionaliteit en wordt gebruikt om invoer voor het grondwaterstromingsmodel MODFLOW aan te maken. Met het postprocessing gedeelte kunnen de resultaten van de geohydrologische berekeningen bestudeerd worden en kan invoer voor het transportmodel STYXZ aangemaakt worden. Het postprocessing gedeelte bevat een beperkte functionaliteit.

5.3.2 MODFLOW

Met behulp van het programma MODFLOW (a MODular three-dimensional finite-difference ground-water FLOW model) wordt de grondwaterstroming berekend. Het programma is door de United States Geological Survey (USGS) ontwikkeld. Door WL is een aantal wijzigingen aangebracht.

De grondwaterstroming die met MODFLOW wordt berekend, is gebaseerd op twee belangrijke grondwaterbeginselen: de wet van Darcy en de continuïteitsvergelijking. De wet van DARCY legt een verband tussen de doorlatendheid van een watervoerend pakket en de stijghoogtegradiënt van het grondwater. De continuïteitsvergelijking is in feite hetzelfde als de wet van behoud van massa. Op basis van deze beginselen bepaalt MODFLOW de grondwaterstroming met behulp van de zgn. 'eindige-differentiemethode'. Dit is een iteratieve methode waarmee, in tegenstelling tot een analytische methode of de eindige elementen methode, een grondwaterstroming berekend kan worden met een zeer kleine balansfout. Bovendien wordt naast het potentiaalverloop ook het stromingsveld bepaald. MODFLOW sluit hiermee optimaal aan op de grondwater-verspreidingsmodellen.

De invoer voor MODFLOW wordt aangemaakt met het programma MODGRID. De invoer bevat informatie over de opbouw van het rekengrid, de dikten van de verschillende geologische afzettingen, de doorlatendheid en de weerstand van deze pakketten, de randpotentialen van het model, informatie over neerslag, de grondwateronttrekkingen e.d. Deze invoer wordt afgeleid uit geohydrologische kaarten, geologische kaarten, stijghoogtemetingen, onttrekkingsgegevens e.d. de uitvoer van het model bestaat onder andere uit de stijghoogte van alle gemodelleerde afzettingen en alle waterfluxen tussen de geschematiseerde gridcellen.

5.3.3 STYXZG

STYXZG (de G staat voor Grid) is het koppelingsprogramma tussen de hydrologische berekening (MODFLOW) en de transport-berekening (STYXZ). Het programma maakt de uitvoer van MODFLOW (na verwerking door MODGRID) geschikt voor verdere verwerking in STYXZ. Het programma heeft een aantal taken:

- verwerking van de diffusie en de dispersie in het transportveld;
- verwijdering van overtollige delen van het hydrologische model;
- opsplitsing van modellen;
- overige manipulaties zoals het sluiten van modelranden, het omleiden van transporten enz;
- vertaling van de geformatteerde gegevens naar ongeformatteerde, snel leesbare, invoer voor STYXZ.

Verwerking van de diffusie en de dispersie in het transportveld

Het stromingsveld dat door een hydrologisch model wordt berekend bevat uitsluitend het advectioneel transport. Bij stoftransport zijn echter dispersie (longitudinaal en transversaal) en diffusie ook van belang. In STYXZG wordt de waarde van deze transporttermen als totale term berekend (diffusie+dispersie) en toegevoegd aan het advectioneel transport.

Verwijdering van overtollige delen van het hydrologische model

Meestal is het gebied dat het hydrologische model beslaat groter dan voor het transportmodel noodzakelijk is. Het kan in dat geval een hoop rekentijd besparen als het niet gebruikte deel uit de schematisatie verwijderd wordt. Bovendien is de stroming in de rand van een hydrologisch model in het algemeen niet correct door numerieke effecten. Daarom wordt deze rand vrijwel altijd uit het model verwijderd.

Opsplitsing van modellen

Een hydrologisch model is gewoonlijk opgebouwd uit een aantal lagen van aanzienlijke dikte (orde meters). Bij een transportmodel is het noodzakelijk in sommige lagen kleine laagdikten (orde (tientallen) centimeters) te gebruiken indien het diffusieve transport bij de berekeningen van belang is. Deze laagopdeling kan met behulp van verdelingsfactoren verkregen worden.

Overige manipulaties zoals het sluiten van modelranden, het omleiden van transporten enz.

Het blijkt in de praktijk handig te zijn om aanpassingen te kunnen doen in het transportmodel. Hierbij moet gedacht worden aan het sluiten van randen voor transport, het aanpassen van eigenschapsnummers, het omkeren van de debieten, het aanpassen van de dispersie enz.

Vertaling van de geformatteerde gegevens naar ongeformatteerde, snel leesbare invoer voor STYXZ

De invoerfiles voor STYXZG bestaan uit forse ASCII-files, die betrekkelijk traag zijn in te lezen. Teneinde de rekensnelheid van STYXZ op te voeren worden de invoerfiles voor STYXZ ongeformatteerd weggeschreven.

5.3.4 STYXZ

STYXZ (Simulation of Transport in a three-dimensional (YXZ) space) is het hart van het verspreidingsmodel. Dit programma voert de feitelijke transport-berekening uit met behulp van de resultaten van STYXZG en additionele invoer. Het resultaat van een berekening is de verspreiding van de stof in de tijd, die vervolgens met het grafische programma STYXZF en met het analyseprogramma STYXZP verder bestudeerd kan worden.

STYXZ bepaalt het transport van een stof in het grondwater op basis van drie verspreidingsmechanismen:

- advectioneel transport;
- diffusief transport;
- dispersief transport.

Het advectieve transport vindt plaats door massastroming, het diffusieve transport door diffusie en het dispersieve transport door dispersie. Omdat het diffusieve en het dispersieve transport met eenzelfde formulering beschreven worden hanteert STYXZ voor beide transportvormen slechts één formulering, waarin een diffusie/dispersiecoëfficiënt is opgenomen die bestaat uit de sommatie van de diffusie en de dispersiecoëfficiënt.

Met betrekking tot de chemie houdt STYXZ rekening met lineaire adsorptie en desorptie, met vorming en afbraak en in beperkte mate met reacties indien in de redox-optie wordt gerekend. Bovendien kan de vorming van metabolieten bijgehouden worden, en kan het transport van een stof tegelijk met de verspreiding van opgelost organische koolstof (DOC) beschouwd worden.

De invoer van STYXZ moet worden opgegeven in een speciale invoer-file. Hierin moet informatie gegeven worden over de chemisch opbouw van het gemodelleerde systeem (adsorptiecapaciteit, bulkdichtheid), over de concentraties, de te gebruiken adsorptieparameters, de transportparameters afbraakcoëfficiënten en over tijdparameters.

5.3.5 STYXZMAP

STYXZMAP is het presentatieprogramma waarmee de resultaten van een berekening op het scherm gepresenteerd kunnen worden. Hiertoe kunnen uitsneden uit het model geselecteerd worden (X, Y of Z). Voor deze uitsneden kan op elk tijdstip het concentratieverloop zichtbaar gemaakt worden. Er kunnen meerdere uitsneden tegelijk op het scherm getoond worden, zodat snel een inzicht in de verspreiding verkregen kan worden. De resultaten kunnen direct van het scherm naar de printer gestuurd worden.

STYXZMAP is interactief, zodat de commando's via het scherm gegeven moeten worden in plaats van via een invoer-file. Als het programma gestart wordt verschijnt een opkomst scherm met een keuzemenu. Vervolgens kunnen met de muis keuzen gemaakt worden. Hierbij kan de positie van de figuren, de legenda, het aantal figuren, de schaling e.d. naar keuze ingesteld worden.

5.3.6 STYXZP

Het programma STYXZP (de P staat voor Postprocessing) geeft de mogelijkheid informatie uit de transportberekening file te kwantificeren. Het programma kan met een invoerfile gestuurd worden maar kan ook interactief via een gebruiksmenu toegepast worden. Bij interactief gebruik kunnen de resultaten direct op het scherm geplot worden. Bovendien worden de resultaten in verschillende files weggeschreven. De commando's die interactief en in een invoerfile gegeven worden zijn in principe hetzelfde.

STYXZP kan in principe informatie genereren voor elk onderdeel van het gemodelleerde systeem. Deze informatie kan bestaan uit fluxen in- of uit de verschillende onderdelen van het systeem, concentraties op alle punten, gemiddelde en maximale concentraties, massa's in het systeem, de uitloging van het depot e.d.

5.4 Fileoverzicht

De verschillende programma's gebruiken een groot aantal files. De meeste van deze files worden op de extensie ('achternaam') herkend. Als in het fileoverzicht de voornaam 'NAAM' wordt gebruikt, betekent dit dat deze naam in principe vrij gekozen mag worden. Elke andere naam is een verplichte naam. De files die in het overzicht gearceerd zijn weergegeven zijn optioneel en hoeven dus niet bij elke toepassing aanwezig te zijn. De namen die tussen haakjes achter de files staan geven aan welk programma deze files produceert.

5.4.1 Fileoverzicht oppervlaktewatermodel

Tabel 5.2 Fileoverzicht van het programma OPPWAT

OPPWAT: verzorgt in-, uitvoer en executie van het oppervlaktewatermodel executable: OPPWAT.EXE			
invoer		uitvoer	
commandofile	interactief	controlefile	
gegevens	OPPWAT.INP CONS.OPP DEPOT.OUT	resultaat	PLOT1.OUN PLOT2.OUN PLOT3.OUN WATER.OUT OPPWAT.UIT OPPWAT1.UIT OPPWAT2.UIT OPPWAT3.UIT

5.4.2 Fileoverzicht grondwatermodel

Tabel 5.3 Fileoverzicht van het programma MODGRID pre

MODGRID: <i>aanpassing schematisatie / aanmaak invoer aan voor MODFLOW</i> executable: <i>MGPRE.EXE</i>			
invoer		uitvoer	
commandofile	interactief	controlefile	
gegevens	MODGRID.CFG NAAM.DIM NAAM.IDM NAAM.PAR NAAM.VAR NAAM.XY	resultaat	NAAM.DIM NAAM.IDM NAAM.BAS NAAM.BCF NAAM.SIP NAAM.PCG NAAM.REI NAAM.wI NAAM.KHX NAAM.KHY NAAM.KVZ NAAM.SRF NAAM.TOP NAAM.BOT NAAM.POR NAAM.THI NAAM.RBE NAAM.RBR NAAM.RCH NAAM.WEL NAAM.LTI NAAM.INI NAAM.FIX

Tabel 5.4 Fileoverzicht van het programma MODFLOW

MODFLOW: berekent de grondwaterstroming			
executable: MODFLOW.EXE			
invoer		uitvoer	
commandofile		controlefile	NAAM.SCR
gegevens (allen uit MODGRID)	NAAM.DIM NAAM.IDM NAAM.BAS NAAM.BCF NAAM.SIP NAAM.PCG NAAM.REI NAAM.wI NAAM.KHX NAAM.KHY NAAM.KVZ NAAM.SRF NAAM.TOP NAAM.BOT NAAM.POR NAAM.THI NAAM.RBE NAAM.RBR NAAM.RCH NAAM.WEL NAAM.LTI NAAM.INI NAAM.FIX	resultaat	NAAM.CHO NAAM.CVG NAAM.DDO NAAM.HEO NAAM.ODM NAAM.OPC NAAM.REO NAAM.SFO NAAM.wLO

Tabel 5.5 Fileoverzicht van het programma MODGRID post

MODGRID: toont resultaten MODFLOW/maakt invoer aan voor STYXZ			
executable: MGPOST.EXE			
invoer		uitvoer	
commandofile	interactief	controlefile	
gegevens	MODGRID.CFG NAAM.DIM (MODGRID) NAAM.IDM (MODGRID) NAAM.ODM (MODFLOW) NAAM.PAR NAAM.VAR NAAM.XY	resultaat	NAAM.ST1 NAAM.ST2

Tabel 5.6 Fileoverzicht van het programma STYXZG

STYXZG: verwerkt de resultaten van een hydrologische berekening tot een transportveld waarmee STYXZ verder kan rekenen			
executable: STYXZG.EXE			
invoer		uitvoer	
commandofile	NAAM.ING	controlefile	NAAM.SGO
gegevens	NAAM.ST1 (MODGRID) NAAM.ST2 (MODGRID)	resultaat	FLOW.UNF VOL.UNF FLOWC.UNF FLOWF.UNF

Tabel 5.7 Fileoverzicht van het programma STYXZ

STYXZ: berekent het transport van verontreinigingen executable: STYXZ.EXE			
invoer		uitvoer	
commandofile	NAAM.INP	controlefile	NAAM.OUT
gegevens	FLOW.UNF (STYXZG) VOL.UNF (STYXZG) FLOWF.UNF (STYXZG) STYXZ.DOC (STYXZ) STYXZ.MET (STYXZ)	resultaat	NAAM.FLM NAAM.LGT NAAM.DOC NAAM.MET

Tabel 5.8 Fileoverzicht van het programma STYXZMAP

STYXZF: toont de resultaten van een STYXZ-berekening op het scherm executable: STYXZMAP.EXE			
invoer		uitvoer	
gegevens	NAAM.FLM (STYXZ) NAAM.MAP BEBOUWD.MPL BOOMGRD.MPL BOS.MPL HOOFDWEG.MPL LAND.MPL SNELWEG.MPL WATER.MPL WATERLN.MPL WATERWEG.MPL WEGEN.MPL	resultaat	

Tabel 5.9 Fileoverzicht van het programma STYXZP

STYXZP: geeft een getalsmatige analyse van de resultaten van een STYXZ-berekening executable: STYXZP.EXE			
invoer		uitvoer	
commandofile	interactief of STYXZP.POP		
gegevens	NAAM.FLM (STYXZ)	resultaat	TMP.POP NAAM.PBF NAAM.PBM NAAM.PLB NAAM.PLC NAAM.PLG NAAM.PLL NAAM.PLM NAAM.PLV NAAM.PLX

6 Gebruik systeem

In dit hoofdstuk wordt ingegaan op het gebruik van het nieuwe ORPHEUS. Vermoedelijk is veel van de materie die beschreven wordt voor veel mensen betrekkelijk nieuw. Bovendien worden er geen voorbeelden gegeven. Als hoofdstuk 3 is daarom een 'getting started' opgenomen, waar de volledige opbouw van een case wordt beschreven. Het is aan te bevelen eerst hoofdstuk 3 door te werken alvorens aan hoofdstuk 6 te beginnen.

6.1 Beschikbare handleidingen

Voor de verschillende onderdelen van het nieuwe ORPHEUS zijn afzonderlijke handleidingen beschikbaar. Deze handleidingen zijn in het algemeen zeer compleet en zijn als zelfstandige documenten in de bijlagen opgenomen. Dit betekent dat op deze plek vooral op het gebruik van de verschillende modellen zal worden ingegaan en dat voor de precieze invulling naar de bijlagen wordt verwezen.

De volgende handleidingen zijn beschikbaar:

- **ORPHEUS (oud)**

Ten behoeve van de oude versie van het modelinstrument ORPHEUS is in 1989 een handleiding verschenen voor het gebruik van dit instrument. De titel van deze manual is: 'ORPHEUS, modelinstrument voor onderzoek naar de effecten van de berging van specie in diepe zandwinputten', geproduceerd door WL, Heidemij en Hydroqual (WL, 1989). In deze handleiding worden alle modulen van het oude ORPHEUS beschreven.

Voor het gebruik van de oppervlaktewater module, die integraal in het nieuwe ORPHEUS is opgenomen, is het betreffende gedeelte van de oude handleiding letterlijk in de handleiding van het nieuwe ORPHEUS opgenomen. Dit deel kan achterin de handleiding worden teruggevonden.

- **MODGRID**

Voor MODGRID is nog geen handleiding als zelfstandig document beschikbaar. Achterin de handleiding van het nieuwe ORPHEUS is de handleiding zoals die op dit moment beschikbaar is opgenomen (bijlage B.1). Deze handleiding geldt voor MODGRID zowel als pre- en als postprocessor.

- **MODFLOW**

Voor MODFLOW is een Engelstalige handleiding en programmabeschrijving beschikbaar. Omdat dit een commercieel verkrijgbaar produkt is, is deze in verband met auteursrechten niet in de ORPHEUS-manual opgenomen. De manual heeft de volgende titel 'A modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model' en wordt uitgegeven door de US Geological Service. De handleiding kan besteld worden bij de Scientific Software Group, P.O. Box 23041, Washington, D.C. 20026-3041. Deze manual wordt vooral aanbevolen indien men in de inhoudelijke achtergronden van MODFLOW is geïnteresseerd en is niet echt noodzakelijk bij het gebruik van het nieuwe ORPHEUS.

- **STYXZ**
Voor de STYXZ-programma's (STYXZG, STYXZ, STYXZF en STYXZP) is een handleiding beschikbaar onder de titel: STYXZ, handleiding STYXZ 5.10, uitgegeven door WL (Gerrits, 1995). Deze vervangt de versie van STYXZ 5.0, die in het najaar van 1994 is uitgekomen. De handleiding is volledig in bijlage B.2 van de handleiding van het nieuwe ORPHEUS opgenomen.
- **CMT**
De schil rond het nieuwe ORPHEUS is opgebouwd met behulp van het CMT (case management tool). Een handleiding hiervoor is opgenomen in bijlage A4 van deze manual. Deze handleiding is vooral bedoeld voor diegene die wijzigingen aanbrengen in de opbouw (samenstelling) van ORPHEUS 2.0. Dit zullen in principe alleen de zeer ervaren gebruikers zijn.

6.2 Gebruik CMT menuschil

Als ORPHEUS 2.0 wordt gestart verschijnt het menuscherm dat in Figuur 6.1 is weergegeven. In dit scherm kan de gebruiker kiezen wat hij gaat doen. Dit kan bestaan uit het aanpassen van het modelinstrument, de keuze van modelscenario's of uit het uitvoeren van modelberekeningen. In het algemeen zal deze laatste optie gekozen worden. Het wordt afgeraden ook het modelinstrument aan te passen. De verschillende keuzen kunnen gemaakt worden door deze met de muis aan te klikken.



Figuur 6.1 opkomtscherm ORPHEUS 2.0

In de bovenbalk van het keuzemenu geeft mogelijkheden voor modelontwikkeling en scenario-keuze. Hierbij zijn de volgende opties beschikbaar:

Ontwikkel oppervlaktewatermodel

Bij deze optie kan de opbouw van het oppervlaktewaterinstrument aangepast worden en kunnen scenario's gedefinieerd worden voor de oppervlaktewaterkwaliteitsberekeningen. Er zijn de volgende keuzen beschikbaar:

- **Ontwerp oppervlaktewater modellen-schema:**
Met deze optie kan de opbouw van het oppervlaktewatermodel gewijzigd worden. Dit betekent dat er modellen toegevoegd kunnen worden (extra 'hokje') en dat er logische verbanden tussen de verschillende hokjes gewijzigd kunnen worden. Indien het modellen-schema wordt aangepast, moet ook nieuwe programmatuur met bijhorende files toegevoegd worden. De ontwerp optie moet dus uitsluitend bij de aanmaak van een nieuwe ORPHEUS-versie gebruikt worden.
- **Beheer consolidatiescenario's:**
Bij deze optie kan een nieuw consolidatiescenario aangemaakt worden. De keuze en eventuele wijziging verloopt via een keuzemenu en een editor. Als een nieuw scenario aangemaakt moet worden, moet eerst een oud scenario gekopieerd worden en moeten in deze kopie vervolgens nieuwe waarden ingevuld worden.
- **Beheer speciekwaliteits-scenario's:**
Bij deze optie wordt het specielaa-model van ORPHEUS geactiveerd. In dit model kan een speciekwaliteit ingevoerd worden voor een zestal zware metalen en organische verbindingen. Voor de verdere werking van het specielaa-model wordt naar de handleiding van het oude ORPHEUS verwezen. De aangepaste speciekwaliteit kan als een nieuw scenario opgeslagen.
Indien de procesparameters die voor de verschillende microverontreinigingen gehanteerd worden aangepast moeten worden, dan moet dit in deze stap plaatsvinden ('invoer microchemische gegevens'). Deze waarden kunnen weliswaar ook in het oppervlaktewaterkwaliteitsmodel aangepast worden ('invoer procesparameters microchemische verontreinigingen'), maar deze waarden worden vervolgens niet bewaard. Indien het oppervlaktewaterkwaliteitsmodel vervolgens opnieuw wordt opgestart zullen de waarden van voor de wijziging weer in de file te vinden zijn!
- **Beheer oppervlakte defaultwaarden:**
Ook hier kan een set van defaultwaarden gekozen worden uit een lijst van beschikbare sets. De keuze een aanpassing hiervan verloopt op een vergelijkbare wijze als bij de consolidatie en de specieklassen.
- **Verlaat ORPHEUS 2.0 schil:**
Met deze optie wordt de ORPHEUS 2.0 menu schil verlaten.

Ontwikkel grondwatermodellen

Bij deze optie kan de opbouw van het grondwatermodellenschema aangepast worden en kan een hydrologisch scenario gekozen worden. De zijn de volgende opties beschikbaar:

- **Ontwerp grondwatermodellenschema:**
Hierbij kan de opbouw van het grondwaterinstrument aangepast worden. Evenals bij het oppervlaktewatermodel geldt dat er bij aanpassingen files en programma's toegevoegd moeten worden, zodat een nieuwe ORPHEUS-versie ontstaat. Het wordt afgeraden het modellenschema aan te passen.
- **Beheer MODFLOW schematisatie:**
Bij deze optie bestaat de mogelijkheid een ander hydrologisch modelgebied of een andere hydrologische variant te definiëren. Hiertoe kan een bestaande variant gekopieerd worden en vervolgens met MODGRID aangepast worden tot een nieuwe variant.

Hulpmiddelen

Bij de hulpmiddelen wordt een aantal mogelijkheden gegeven waarmee de instellingen van het CMT aangepast kunnen worden. Deze aanpassingen kunnen simpel zijn, zoals de keuze van de taal, maar kunnen ook ingewikkeld zijn, zoals de instelling van de schil. Er wordt aangeraden de eerste drie keuze-opties niet te gebruiken. Wel kan de taal aangepast worden met de vierde en de vijfde keuze-optie.

De volgende opties zijn beschikbaar:

- **Pas ORPHEUS 2.0 schil aan:**
Met deze optie kan de opbouw van het opkomst-keuzemenu aangepast worden. Hiertoe moet een file aangepast worden die bij deze optie in de editor NOTEPAD op het scherm getoond wordt. De betekenis van de verschillende instellingen die in de file beschreven worden, is in de handleiding van het CMT terug te vinden. Er wordt aangeraden deze instellingen niet te veranderen.
- **Pas taalbestand schil aan:**
De meldingen die door het instrument gegeven kunnen worden, zijn opgenomen in een taal-bestand. Als dit bestand wordt gewijzigd, zullen de boodschappen die het instrument naar het scherm stuurt dus veranderen. Het bestand kan aangepast worden indien meldingen niet duidelijk zijn. Dit wordt echter voor beginnende gebruikers afgeraden.
- **Herinitialiseer schil:**
Nadat bij de opties 'pas oppervlaktewatermodel aan', 'pas grondwatermodellen aan', 'pas ORPHEUS 2.0 schil aan' of 'pas taalbestand aan' wijzigingen zijn aangebracht, moet de schil opnieuw geïnitieerd worden teneinde wijzigingen ook daadwerkelijk door te voeren. Deze herinitialisatie kan met deze optie plaatsvinden.

- English language:
Met deze optie wordt de taal van het instrument ingesteld op Engels.
- Nederlandse taal:
Met deze optie wordt de taal van het instrument ingesteld op Nederlands.

Help

Bij de help-optie wordt voor een aantal onderwerpen ondersteuning geboden. Dit betreft de volgende zaken:

- Introductie Delft DSS:
Hier wordt een inleiding gegeven in de mogelijkheden die het Delft-DSS systeem biedt (DSS=decision support system).
- Gebruik ORPHEUS 2.0 schil programma:
Hier wordt een beschrijving gegeven van de mogelijkheden van de schil van ORPHEUS 2.0. Deze mogelijkheden worden ook in de handleiding van het CMT (Bijlage A4) beschreven.
- Gebruik van WINDOWS help programma:
Hier wordt een algemeen overzicht gegeven van het gebruik van een help-optie binnen WINDOWS.
- Over ORPHEUS 2.0 schil:
Deze optie laat zien wie er verantwoordelijk zijn voor ORPHEUS 2.0, waar de help desk zich bevindt en wie het instrument toe mogen passen.

In het rechter keuzemenu kunnen de modellen gedraaid worden en kan een kaart van het beschouwde gebied geselecteerd worden. Er zijn de volgende opties beschikbaar:

- Bekijk kaart van Nederland:
Hier is het mogelijk de kaart van Nederland te bekijken (1:250000) met behulp van het pakket MAPPER. Voor verdere aanwijzingen over het gebruik van MAPPER wordt naar de handleiding van dit pakket verwezen (Bijlage A5).
- Bekijk gebiedskaart:
Hier is het mogelijk de kaart van het studiegebied te bekijken en eventueel aan te passen met behulp van het pakket MAPPER. De kaart die getoond wordt, is afkomstig van de 1:50000 kaart van Nederland. Voor verdere aanwijzingen over het gebruik van MAPPER wordt naar de handleiding van dit pakket verwezen (Bijlage A5).
- Draai oppervlaktewatermodellen:
Bij deze optie wordt het oppervlaktewatermodel geactiveerd. Het gebruik van dit mode wordt in paragraaf 6.3 uitvoerig beschreven.

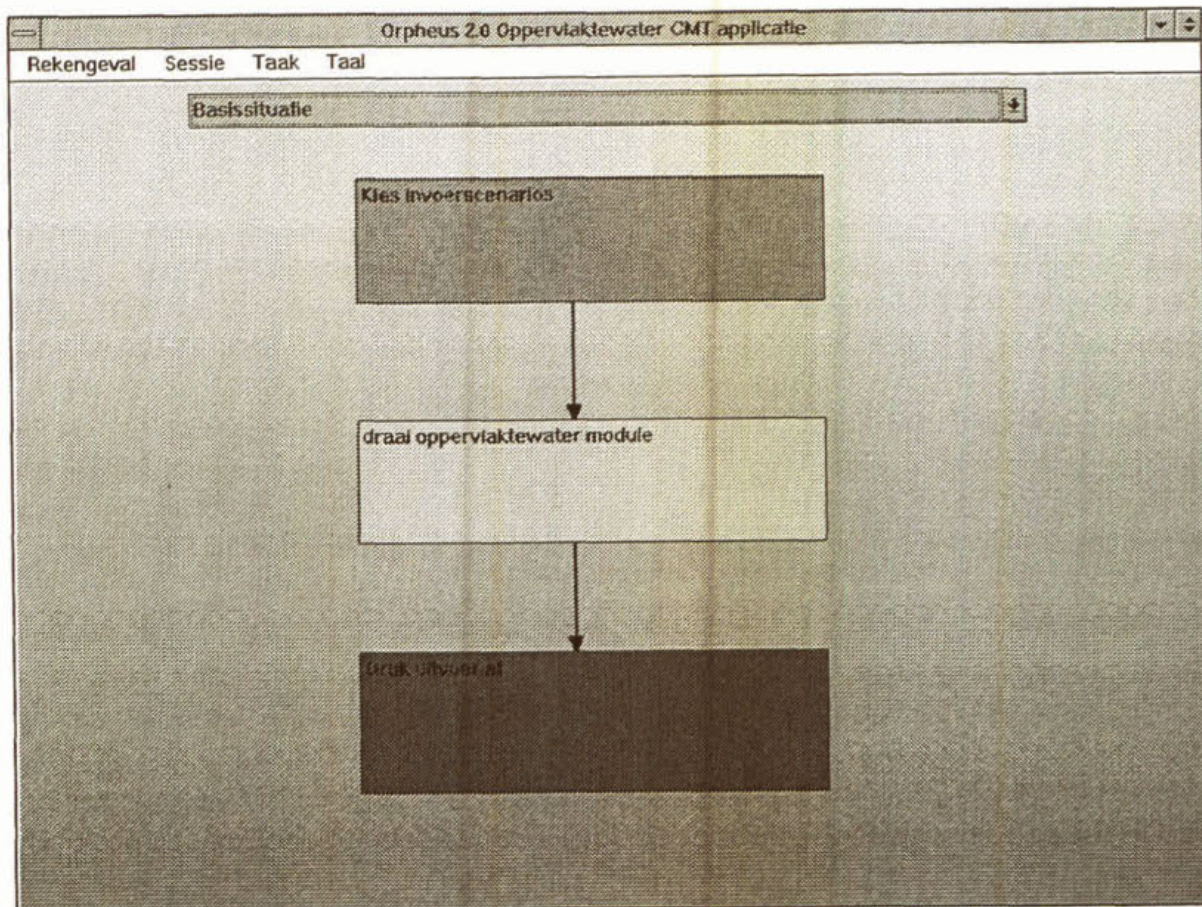
- Draai grondwatermodellen:
Bij deze optie wordt het grondwatermodel geactiveerd. Het gebruik van dit model wordt in paragraaf 6.4 uitvoerig beschreven.

Verlaat ORPHEUS 2.0 schil:

Met deze optie wordt het CMT verlaten.

6.3 Gebruik oppervlaktewatermodel

Het gebruik van het oppervlaktewatermodel is binnen het nieuwe ORPHEUS hetzelfde als bij het oude ORPHEUS. Voor het inhoudelijke deel van het gebruik wordt dus verwezen naar de oude handleiding, waarvan het deel met betrekking tot het oppervlaktewatermodel in Bijlage B1 is opgenomen.



Figuur 6.2 CMT oppervlaktewater

Het oppervlaktewatermodel wordt bereikt door de optie 'draai oppervlaktewatermodellen' te kiezen in het hoofdmenu van het CMT. Er verschijnt dan een schema zoals in Figuur 6.2 wordt getoond. Het schema zelf stelt de verschillende stappen voor die bij een modelberekening doorlopen moeten worden. Boven het schema is een keuzebalk aangebracht waarmee het rekenscenario geselecteerd wordt. Met behulp van de bovenste keuzebalk kunnen scenario's opgeslagen worden en kan bijvoorbeeld de taal ingesteld worden.

Nadat met de keuzebalk een case is gekozen, worden de blokken in het schema van een kleur voorzien. Groen betekent dat de taak correct is uitgevoerd, geel betekent dat de taak uitgevoerd kan worden en rood betekent dat de taak nog niet uitgevoerd mag worden. Er kunnen drie taken gekozen worden:

- 1) kies invoerscenario's;
- 2) draai oppervlaktewatermodule;
- 3) druk uitvoer af.

Nadat een case is doorgerekend, moet deze worden opgeslagen. Dit kan met behulp van de 'rekengeval' keuzeknop. Indien hier de optie 'bewaar' wordt gekozen wordt de aangepaste case onder de oude naam opgeslagen. Indien de optie 'bewaar als ..' wordt gekozen, kan een nieuwe naam opgegeven worden, waarna het model verlaten kan worden. Het model kan ook verlaten worden zonder de aangepaste case te bewaren.

'Kies invoerscenario's'

Bij het oppervlaktewatermodel worden drie invoerfiles gebruikt: de invoer uit het consolidatiemodel, de invoer uit het specielaagmodel en de invoer voor het oppervlaktewatermodel. Bij deze optie wordt de mogelijkheid geboden uit een aantal scenario's een compleet waterkwaliteitsscenario samen te stellen. Hiertoe zijn de volgende opties beschikbaar:

- selecteer een baggerspecie kwaliteitsscenario;
- selecteer een consolidatiedebiet scenario;
- selecteer een set van verstekwaarden voor de oppervlaktewater module.

Bij de eerste keuze wordt een baggerspecie kwaliteit gekozen. Deze kwaliteit moet worden ingevoerd met behulp van het specielaagmodel bij de optie 'beheer speciekwaliteits scenario's' bij de keuze 'ontwikkel oppervlaktewatermodel'.

Bij de tweede keuze wordt een consolidatiedebiet ingesteld. In ORPHEUS 2.0 zijn vier default consolidatiescenario's opgenomen. Hiervan kan er één gekozen worden, of kan er één gebruikt worden als basis voor een nieuw scenario. Bij de aanmaak van een nieuw scenario moet met behulp van een editor het verloop van de consolidatie ingevoerd worden.

Bij de derde keuze kan een set van defaultwaarden voor het oppervlaktewatermodel gekozen worden. Deze waarden kunnen in de volgende stap ('draai oppervlaktewatermodule') eventueel nog aangepast worden.

De gekozen set van speciekwaliteit, consolidatiedebiet en oppervlaktewaterkwaliteit wordt doorgegeven aan de volgende werkstap.

'Draai oppervlaktewatermodule'

Bij deze optie wordt het oppervlaktewatermodel binnen de menuschil van het oude ORPHEUS opgestart. Alle keuzemogelijkheden, inclusief presentatie van de resultaten op het scherm, zijn dan beschikbaar. Voor een verdere uitleg van de verschillende opties wordt dan ook naar de handleiding van het oude ORPHEUS verwezen, die is opgenomen in Bijlage B1. Bij het gebruik van het oppervlaktewatermodel moet erop gelet worden dat de ESQ-toets ertoe leidt dat het programma ongecontroleerd gestopt wordt, zodat alle tot dan toe aangebrachte wijzigingen verloren gaan. Om het model gecontroleerd te stoppen moet dit dus met de optie 'Ga terug ORPHEUS.' verlaten worden. Als file-extensie voor de uitvoerfiles moet de default-instelling 'UIT' gekozen worden. Een waarschuwing bij het gebruik van het oppervlaktewatermodel is hier op zijn plaats. Indien de procesparameters die voor de verschillende verontreinigingen gehanteerd worden aangepast moeten worden, dan moet dit bij de keuze 'beheer specieklasse-scenario's' worden uitgevoerd. Het is mogelijk deze waarden ook binnen het oppervlaktewatermodel aan te passen, maar in dat geval worden de aangepaste waarden niet bewaard. Indien het oppervlaktewatermodel vervolgens opnieuw wordt opgestart, zullen de oude waarden weer in de invoer te vinden zijn!

'Druk uitvoer af'

Het resultaat van een berekening met het oppervlaktewatermodel wordt in een uitvoerfile weggeschreven. Vaak is het handig deze file te kunnen printen. Met de optie 'druk uitvoer af' wordt deze mogelijkheid geboden.

6.4 Gebruik grondwatermodel

6.4.1 Modeltechniek

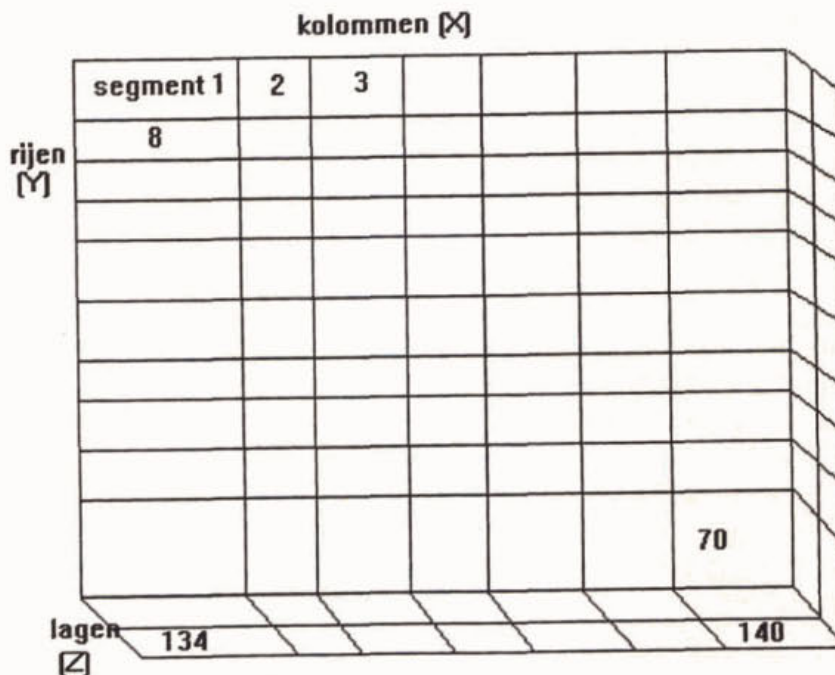
Voordat het gebruik van de grondwatermodellen wordt beschreven, zal eerst enige aandacht worden geschonken aan de techniek en de terminologie die gewoonlijk bij numerieke modellen wordt gebruikt. Dit betreft vooral het opdelen van het model in numerieke eenheden.

Bij de bestudering van de verspreiding van een stof in het grondwater met behulp van STYXZ wordt de ondergrond driedimensionaal (of eventueel tweedimensionaal) geschematiseerd. Dit betekent dat een abstractie van de werkelijkheid wordt gemaakt, die als invoer voor het model gebruikt kan worden.

Allereerst moet een gebied gekozen worden waarvoor de berekening wordt uitgevoerd. Dit gebied wordt in de horizontaal begrensd door een X- en een Y-coördinaat, en in de verticaal door een diepte (Z). Deze begrenzingen worden in eerste instantie bepaald door de hydrologie van het gebied. De horizontale begrenzing wordt hierbij zo gekozen dat er duidelijke hydrologische randvoorwaarden gekozen kunnen worden. In de diepte wordt vaak de diepst gelegen watervoerende laag die voor de hydrologie van het gebied van belang is als begrenzing gekozen, tenzij de modellering van het stoftransport vereist dat ook de scheidende laag in het model wordt opgenomen. Dit is relevant indien onderin het watervoerende pakket hoge concentraties verwacht worden, zodat er door diffusie een aanzienlijk stoftransport naar de scheidende laag kan optreden.

Vaak wordt ten behoeve van de transportmodellering uit dit hydrologische model een deelmodel gekozen. Het voordeel hiervan is dat de randpotentialen van dit deelmodel al in het regionale model zijn berekend, zodat deze niet meer handmatig ingesteld moeten worden. De horizontale begrenzing van dit deelmodel wordt bepaald door de mobiliteit van de te modelleren verontreiniging en door de vraagstelling die aan de studie ten grondslag ligt. Indien de mobiliteit van de stof bepalend is, worden de horizontale grenzen zo gekozen dat de stof zich binnen de te beschouwen periode niet over de randen van het model verplaatst. Soms leidt de vraagstelling ertoe dat het niet van belang is dat een deel van de verontreiniging het model via de randen verlaat, en kan een kleiner model gebruikt worden.

Het gekozen gebied wordt in de horizontaal door een rechthoek begrensd. In de verticaal (diepte) is de begrenzing variabel. Deze variatie kan veroorzaakt worden door een variabele diepteligging van watervoerende lagen. Vervolgens wordt over het gebied een verdeling van rekenvakken gelegd: het rekengrid. Dit grid moet rechthoekig zijn, maar mag variabel opgebouwd zijn. Het grid is het fijnst op de plekken die voor de studie het belangrijkste zijn. In de verticaal wordt in het algemeen de diepteligging van watervoerende en scheidende lagen als begrenzing gekozen. Vaak worden deze lagen in meerdere sub-lagen opgesplitst. De opdeling die op deze wijze ontstaat wordt in Figuur 6.3 weergegeven.



Figuur 6.3 Voorbeeld van een rekengrid dat ten behoeve van transportmodellering wordt gebruikt

Het geschematiseerde gebied is nu het rekenmodel, vaak ook aangeduid als het systeem. De kleinste elementen waaruit dit model is opgebouwd, worden aangeduid als gridcellen of als segmenten. De afmeting van deze segmenten bepaalt het oplossend vermogen van het model. Het model wordt begrensd door zes modelranden: de boven- en onderrand en de noord-, oost, zuid- en westrand. Indien het noodzakelijk is, kunnen in het model inactieve segmenten worden opgenomen, indien er bijvoorbeeld een reliëf of een depot gemodelleerd moet worden.

De nummering van het rekengrid is voor STYXZ niet relevant, maar wel voor de presentatie van de resultaten. Omdat vaak in combinatie met MODFLOW wordt gewerkt, wordt de hierbij gebruikte nummering beschreven. Deze bestaat uit kolommen (X constant, Y en Z variabel), rijen (Y constant, X en Z variabel) en lagen (Z constant, X en Y variabel). De kolommen zijn van west naar oost genummerd (linkerkant scherm naar rechterkant), de rijen van noord naar zuid (onderzijde scherm naar bovenzijde) en de lagen van boven naar beneden (bij MODFLOW van beneden naar boven!).

Het model in de figuur bestaat dus uit 7 kolommen, 10 rijen en 2 lagen. Bij de nummering van de segmenten wordt de volgende volgorde aangehouden: kolommen, rijen, lagen, zodat segment 1 links 'boven' in het bovenste vlak ligt. Indien een tweedimensionaal model gebruikt wordt, verandert er in feite niets aan de indeling, maar is het aantal rijen, kolommen of lagen gelijk aan 1.

Elke cel heeft in het model een uniek nummer, dat bepaald wordt uit de ligging van deze cel ($\text{nummer} = ((\text{laagnr}-1) * \text{rijnr} * \text{nkolom}) + ((\text{rijnr}-1) * \text{nkolom}) + \text{kolomnr}$). Bovendien wordt aan elke cel een eigenschapnummer toegekend. Met behulp van dit eigenschapnummer worden binnen STYXZ de chemische eigenschappen van een cel of van een groep cellen vastgelegd. Bovendien kan in de naverwerking het verloop van de massa binnen een groep cellen met eenzelfde eigenschapnummer worden opgevraagd. Vaak wordt het systeem met behulp van de eigenschapnummers opgedeeld (watervoerende pakketten, scheidende lagen, depot, interessante deelgebieden).

Met een model wordt eerst een hydrologische berekening met MODFLOW uitgevoerd, gevolgd door transportberekeningen met STYXZ. Met MODFLOW wordt in een iteratief proces doorgerekend totdat een waterbeweging (stromingsveld waarin alle hydrologische uitwisselingen opgenomen zijn) ontstaat met een balansfout die voor STYXZ acceptabel is. Deze balansfout wordt voor elke gridcel bepaald en geeft de afwijking tussen de instroming en de uitstroming van water. Voor STYXZ is het noodzakelijk dat de afwijking minder dan één celvolume in 10000 jaar is, teneinde te voorkomen dat de cel binnen de rekentermijn een negatieve concentratie krijgt.

Nadat een voldoende nauwkeurige waterbeweging is verkregen, kan met behulp van STYXZ het transport van een verontreiniging bepaald worden. Hierbij rekent het model in tijdstappen, die bepaald worden door gridcel met de kortste verblijftijd. De verblijftijd is de tijd die ervoor nodig is, om op grond van de in- en de uitstroming van een gridcel, de totale massa van de gridcel te vervangen. De gekozen rekentijd is om stabiliteitsredenen de helft van de minimale verblijftijd. Deze tijdstap wordt door STYXZ zelf bepaald.

Nadat de transportberekening is uitgevoerd, kunnen de resultaten met de naverwerkingsprogramma's STYXZMAP en STYXZP op grafische of op analytische wijze bestudeerd worden. Hierbij wordt vooral informatie gerelateerd aan eigenschapnummers gebruikt. Een slimme opdeling van het systeem in de verschillende eigenschapnummers maakt de analyse in het algemeen betrekkelijk eenvoudig. Het is dus zinvol hier vooraf goed over na te denken.

De bediening van de verschillende modellen gebeurt, evenals bij het oppervlaktewatermodel, met behulp van het CMT. In de volgende paragrafen zullen de verschillende werkstappen nader worden toegelicht.

6.4.2 Aanmaak invoer MODFLOW

Voor het grondwatermodel MODFLOW moet beschikbare informatie over de geohydrologische opbouw van het te modelleren gebied in het model worden ingevoerd. Hiervoor worden diverse hulpmiddelen gebruikt zoals GIS-pakketten en interpolatiepakketten (SURFER) e.d. Nadat het model is opgebouwd, worden testberekeningen uitgevoerd waarbij de resultaten onder andere met beschikbare peilbuisgegevens en hydrologische kaarten worden vergeleken. Eventueel worden vervolgens, bij een onvoldoende overeenkomst tussen model en werkelijkheid, modelparameters in een iteratief proces bijgesteld.

Omdat het opbouwen en testen van een hydrologisch model niet in een standaard-protocol is vast te leggen, is dit ook niet binnen een CMT te brengen. De stap waarin het hydrologische model vanaf niets wordt opgebouwd, is dus ook niet in het CMT opgenomen. In het algemeen zal de gebruiker van ORPHEUS 2.0 dan ook uitgaan van een hydrologisch model dat reeds met data is gevuld.

Het geohydrologische model moet als volgt in een CMT ingevoerd worden. Op de directory ORPH_CMT moet een subdirectory GEOHYDRO.*** aangemaakt worden (default zijn al aanwezig GEOHYDRO.RPT en GEOHYDRO.PUT). Op deze subdirectory moeten alle relevante MODGRID-files gekopieerd worden, waarbij de filenaam telkens "DATA" moet zijn. De extensie is de bijhorende MODGRID-extensie (dus DATA.DIM, DATA.DIM, enz.). Verder moet een file DIRINFO aangemaakt worden waar in één regel de titel van de berekening wordt gegeven. Nadat de files in de betreffende directory zijn aangebracht, zal de berekening onder de scenariokeuze beschikbaar zijn. Hier kunnen nog eventuele aanpassingen doorgevoerd worden.

De toepassing van MODFLOW binnen het CMT gaat uit van een volledig uitgewerkt hydrologisch model, dat voldoende is geijkt op de werkelijkheid. De aanpassingen die aan dit model binnen het nieuwe ORPHEUS uitgevoerd kunnen worden, bestaan uit het toevoegen- of wijzigen van een (specie) depot en het aanbrengen van bijhorende wijzigingen in het model (toevoeging gridlijnen, aanpassen weerstanden e.d.). Deze aanpassingen moeten met verstand van zaken uitgevoerd worden teneinde irreële berekeningen te vermijden. Nadat de wijzigingen zijn uitgevoerd, moet MODFLOW opnieuw gedraaid worden, net zolang totdat opnieuw een voldoende nauwkeurige waterbalans is verkregen.

Voor de aanmaak van de invoer van MODFLOW moeten de volgende twee opties gebruikt worden:

'Pas invoer MODFLOW aan'

Bij deze optie wordt MODGRID gestart in de preprocessing mode. Hierin is een groot aantal opties beschikbaar om het hydrologische model aan te passen. Voor de werking en de beschrijving van alle mogelijke opties wordt verwezen naar Bijlage B2 waar een volledige handleiding van MODGRID is opgenomen. De belangrijkste keuzen zullen hier kort beschreven worden.

Teneinde data aan te kunnen passen, moet eerst een parameter gekozen worden. Dit kan door bij de keuzebalk [F1] onder het item 'Data' de optie 'Set active parameter' te kiezen. Rechts onder het scherm verschijnt vervolgens een parameternaam, waaruit met de pijltjestoetsen ([Up],[Down]) een keuze is te maken (bevestigen is [ENTER]). Alle manipulaties hebben vervolgens betrekking op die parameter. Rechts onder aan het scherm is te zien welk deel van het systeem op het scherm te zien is (ix, iy, iz), waarbij de laagtelling (iz) van onder naar boven loopt (!).

De cellen waarop de manipulaties betrekking hebben, moeten bij het item select gekozen worden. Vervolgens kunnen waarden veranderd worden met behulp van het item 'Data'. De aangepaste file kan met de optie 'Quit' onder het item 'Files' opgeslagen worden. Met dezelfde optie wordt MODGRID verlaten. De invoer voor MODFLOW wordt met behulp van de optie 'Generate MODFLOW input' aangemaakt die zich bij het item 'Files' bevindt. Voordat deze wordt aangemaakt, moet gekozen worden of er 'freatic' (freatisch) of 'confined' (spanningswater) gerekend gaat worden. In Nederland komen in het algemeen afgesloten watervoevende pakketten voor, zodat meestal 'confined' wordt gerekend. In dat geval moet een [C] worden ingevoerd.

In het algemeen wordt aangeraden de aanpassingen van de MODFLOW-schematisatie uit te voeren bij de scenariokeuze. De procedure hierbij is hetzelfde als de hierboven beschreven procedure. De aangepaste schematisatie moet vervolgens als een nieuwe hydrologie bewaard worden en onder de scenariokeuze opgevraagd worden.

'Convergentie parameters'

In MODFLOW wordt het stelsel van vergelijkingen dat ontstaat nadat alle hydrologische informatie is ingevoerd, op een iteratieve manier opgelost. Dit betekent dat een oplossing wordt bepaald en dat vervolgens wordt onderzocht wat de afwijking is met de voorgaande oplossing. De iteratie wordt gestopt indien de afwijking van de berekende potentialen en waterbalansen kleiner is dan een bepaald criterium.

De informatie die MODFLOW voor dit iteratieproces nodig heeft, staat in een aparte file die bestaat uit 4 regels. Deze is als volgt opgebouwd (tussen haakjes het format):

regel 1 (3I10):	aantal iteratiestappen, nvt, nvt
regel 2 (F10.2,4I10):	convergentieparameter, aantal uitvoerstappen, nvt, nvt, nvt
regel 3 (A50):	commentaar
regel 4 (2E10.3, I10):	stijghoogte criterium, balanscriterium, aantal...

Van de iteratieparameters zijn de volgende van belang (zie ook 6.3.3, rekenen met MODFLOW):

aantal iteratiestappen:	naar behoefte instellen; afhankelijk van de convergentie (10-2500)
iteratieparameter:	afhankelijk van de convergentie (0.01-1.0)
aantal uitvoersteps:	naar behoefte (kleiner of gelijk aan aantal iteratiestappen)
stijghoogtecriterium:	afhankelijk van de convergentie; voor de uiteindelijke berekening moet deze gelijk zijn aan 0.1E-9 (0.1 um !)
balanscriterium:	afhankelijk van de convergentie; voor de uiteindelijke berekening moet deze gelijk zijn aan 0.1E-9 (0.1 ml !)

Om de invoer van de verschillende parameters in de file te vergemakkelijken is de invoer editor MIE toegevoegd. In deze editor hoeven alleen de getalswaarden van de parameters ingevoerd worden, waarna deze automatisch in het juiste format op de goede plek terecht komen.

6.4.3 Rekenen met MODFLOW

Als alle invoer gereed is, kan een MODFLOW berekening gestart worden. Dit programma itereert op basis van de ingestelde convergentieparameters net zolang totdat aan de gestelde criteria voor de stijghoogte en de waterbalans wordt voldaan. De methode die hierbij in het nieuwe ORPHEUS wordt gehanteerd is de 'strongly implicit procedure', één van de drie rekenmethoden van MODFLOW.

Het iteratieproces houdt in dat het programma een oplossing berekend, deze vergelijkt met de vorige oplossing, op grond van de vergelijking zijn instellingen aanpast, weer een berekening uitvoert, enz. Het is hierbij de bedoeling dat er een convergentie optreedt, hetgeen betekent dat het programma langzaam dichterbij een oplossing komt. Als het programma niet convergeert, zal de oplossing vrijwel niet verbeteren in de tijd, of zelfs slechter worden.

De kunst van het rekenen met MODFLOW is tot een goed convergerende oplossing te komen. Het is niet mogelijk hiervoor een algemene werkwijze te geven. Meestal wordt de volgende methode gehanteerd:

- 1 Stel de convergentieparameter in op 0.95 en reken 50 of 100 stappen (criteria beide op 0.1E-9);
- 2 Kijk bij de optie 'bekijk convergentie en controle' of het model convergeert;
- 3a Verlaag de convergentieparameter als het model niet convergeert; soms is een waarde van 0.15 pas voldoende om een convergerend model te verkrijgen; vervolgens terug naar 2;
- 3b Verhoog het aantal iteratiestappen tot 1000 of 2500 als het model convergeert en laat het model verder rekenen (kies bijvoorbeeld 100 keer modeluitvoer);
- 4a Als de ingestelde criteria niet binnen het opgegeven aantal stappen worden bereikt, stopt het model als alle ingestelde stappen zijn doorlopen; check de convergentie nogmaals en laat het model opnieuw 1000 of 2500 stappen rekenen, eventueel na een lichte bijstelling van de convergentieparameter;
- 4b Het model stopt indien de gestelde criteria zijn bereikt; in dat geval is een correcte waterbeweging bereikt en kan naar de volgende werkstap worden overgegaan. Het is aan te bevelen het uiteindelijke resultaat van de hydrologische berekeningen grondig te bestuderen alvorens verder te gaan met transportberekeningen!

Het rekenen met MODFLOW is behoorlijk tijdrovend. De totale rekestijd is hierbij sterk afhankelijk van de grootte van het gekozen model en van de computer die wordt gebruikt. Voor 2500 rekenstappen moet al gauw een aantal uren uitgetrokken worden. Het is dus aan te raden, om zodra een set parameters is gevonden waarmee het programma convergeert, over te stappen op de batch-mode en het programma in de avonduren tot een oplossing te laten komen. Bovendien wordt geadviseerd een snelle computer in te zetten (bij voorkeur een PENTIUM).

Naast de optie 'convergentie parameters' (zie 6.4.2) zijn bij deze stap de volgende opties van belang:

'Draai MODFLOW'

Bij deze optie, die nog met een batch-mode moet worden uitgebreid, wordt het programma MODFLOW opgestart. Het CMT kopieert vervolgens een aantal files naar een werkgebied, waarna de berekening wordt gestart. Op het scherm verschijnt dan een mededeling over de gebruikte MODFLOW-versie (USGS, versie 1.3, 1988). Vervolgens verschijnt voor elke iteratiestap een regel met 'stress period', 'time step' en 'iteration'. Hierbij verandert alleen de waarde voor iteration, die aangeeft welke iteratiestap op dat moment wordt uitgevoerd. Nadat het model is uitgerekend worden de resultaten weggeschreven. Vervolgens moet bij de optie 'Bekijk de convergentie' gekeken worden of het model tot een goed resultaat is gekomen. Zo niet, dan moet, eventueel na aanpassing van de convergentieparameters, een nieuwe berekening worden uitgevoerd.

Nadat een geohydrologische berekening is uitgevoerd, zal automatisch een transportfile voor STYXZG gegenereerd worden. Dit gebeurt dus ook indien de geohydrologische berekening nog niet correct is. Het doorrekenen met een verkeerde waterbeweging levert dus ook een foute transportberekening!

'Bekijk convergentie en controle'

Bij deze optie wordt de controle-uitvoer van MODFLOW zichtbaar gemaakt. Deze uitvoer bestaat uit een file met informatie over de opbouw van het model en over het verloop van het rekenproces. Voor een uitleg over de betekenis hiervan wordt verwezen naar de handleiding van MODFLOW, omdat maar een paar waarden in de uitvoerfile voor de ORPHEUS berekeningen van belang zijn.

Informatie over het verloop van de convergentie kan op ongeveer 2/3 van de file gevonden worden. Hier komen de regels 'MAXIMUM HEAD CHANGE FOR EACH ITERATION' en 'MAXIMUM WATER BALANCE ERROR FOR EACH ITERATION' voor. Na elk van deze regels wordt een getallenblok gegeven waarin de verandering van de stijghoogte (head change) of de waterbalans fout (water balance error) gegeven wordt.

In het getallenblok staan per regel vijf getallen met daarachter telkens tussen haakjes drie integers. Het getal is de verandering van de stijghoogte of de waterbalansfout. De getallen tussen haakjes geven aan in welke cel deze (maximale) fout optreedt.

Om na te gaan of een model convergeert, moet de lijn in de getalswaarden van de stijghoogteverandering en de waterbalansfout gevolgd worden. Bij een nieuw model zal deze zeer hoog beginnen (grote fout). Als het model convergeert, daalt de waarde in de tijd. Als de waarde constant blijft, of fluctueert, zal het model niet convergeren, en moet de convergentieparameter worden bijgesteld. Als de laatste waarde lager voor beide fouten (zowel stijghoogte als waterbalans) is dan de opgegeven criteria (meestal 0.1E-9), voldoet het model aan de eisen voor een transportberekening, en kan met de volgende werkstap worden begonnen.

6.4.4 Rekenen met STYXZG

Het programma STYXZG vertaalt de waterfluxen die met MODFLOW zijn berekend naar een transportveld voor een stof. Daarbij wordt ook de diffusie en de dispersie in dit transportveld verwerkt. Ook wordt in deze werkstap vaak een deel van het hydrologische model uit de schematisatie verwijderd, teneinde een acceptabele rekentijd te verkrijgen. De randen van het hydrologische model worden vrijwel altijd verwijderd, omdat zich in de randcellen vaak verkeerde stromingen bevinden. Verder biedt deze stap de mogelijkheden om de laagopdeling van het model verder te verfijnen, teneinde diffusieprocessen beter te kunnen modelleren.

Bij deze werkstap moet eerst een invoerfile worden aangemaakt. Deze invoerfile bestaat uit commando's en bijhorende parameterwaarden. In de handleiding van STYXZ (Bijlage B3) is een volledig overzicht van alle mogelijkheden opgenomen, inclusief voorbeelden. Voor aanwijzingen met betrekking tot de opbouw van de invoerfile wordt dan ook geheel naar deze handleiding verwezen. Nadat de invoerfile is aangemaakt, wordt het programma STYXZG gedraaid. Het resultaat hiervan bestaat uit een aantal ongeformatteerde files die direct als invoer voor STYXZ worden gebruikt. Met behulp van de controlefile kan gecontroleerd worden of de waterbeweging inderdaad correct is verwerkt.

In het CMT zijn voor deze werkstap de volgende opties beschikbaar:

'Invoer STYXZG'

De invoer van STYXZG bestaat uit een invoerfile met commando's en bijhorende parameterwaarden. De aanpassing van deze file kan binnen het CMT met een menu-gestuurde editor uitgevoerd worden. Hierbij kan uit vier menu-opties gekozen worden:

deel 1 Transportparameters

Hier worden de waarden ingevoerd die verband houden met de commando's POROS, DIFFUS, ALFA-L, ALFA-T, FCT en DIFDIS. Voor een toelichting van deze commando's wordt naar de handleiding van STYXZ verwezen.

deel 2 Opsplitsen lagen voor optimalisatie diffusief transport

In dit menu kan aangegeven worden hoe de laagopdeling van het geohydrologische model verder verfijnd moet worden. Deze verfijning is (meestal) noodzakelijk om het diffusieve transport uit een depot correct te modelleren. Een verdere toelichting op het opdelen van lagen kan in de STYXZ-handleiding gevonden worden bij het commando SPLITHO.

deel 3 Omrekeningsfactor debieten

Bij deze optie kan een factor ingevoerd worden waarmee de debieten uit de geohydrologische berekening vermenigvuldigd moeten worden (CONVDE). MODFLOW rekt meestal in dagen (debiet in m³/dag) terwijl met STYXZ vaak in jaren gerekend wordt (m³/jaar). In dat geval moet dus een omrekeningsfactor van 365.25 ingevoerd worden (dagen→jaren).

Aanpassen include file

Alle informatie die direct door de gebruiker aangepast moet kunnen worden is in de delen 1 t/m 3 opgenomen. In het laatste menu kunnen zaken ingesteld worden die zelden door een gebruiker aangepast moeten worden. De aanpassingen moeten uitgevoerd worden met een normale editor, zodat erop gelet moet worden dat de juiste formats gebruikt worden.

Nadat de invoerfile is aangepast moet deze aangemaakt worden met de optie 'Aanmaken totaal bestand'. Dit moet altijd plaatsvinden nadat wijzigingen in de invoer zijn uitgevoerd. Indien gewenst kan de aangemaakte invoer-file bekeken worden met de optie 'Bekijken totaal bestand'. Het menu wordt verlaten met de keuze 'Return to CMT'.

'Verwerk debiet invoer'

Nadat de invoerfile is aangemaakt kan het programma STYXZG gedraaid worden. Als dit programma rekt, verschijnt op het scherm informatie over de stap die het programma afwerkt. De berekening duurt in het algemeen enkele minuten. Als het programma vastloopt omdat er verkeerde informatie in de invoer is verwerkt, zal in de controlefile meestal een melding aanwezig zijn waarom het programma is vastgelopen. Indien dit gebeurt, moet de invoerfile gecorrigeerd worden en moet het programma nogmaals gedraaid worden.

'Bekijk convergentie en controle'

Het programma STYXZG produceert naast de invoer voor STYXZ ook een controle file. In deze file staat de invoerfile nogmaals afgedrukt, zodat gecontroleerd kan worden of de commando's goed zijn overgekomen en zijn geïnterpreteerd. Indien er fouten in de invoer aanwezig zijn, zal dit eveneens in de file opgenomen zijn. Bovendien is in de file een analyse van de waterbeweging opgenomen. Met behulp van deze analyse kan beoordeeld worden of de waterbeweging correct is. Een volledige beschrijving van de file is in de handleiding STYXZ (Bijlage B3) opgenomen.

6.4.5 Rekenen met STYXZ

Nadat met STYXZG een transportveld is aangemaakt moet met STYXZ de verspreiding van een stof worden berekend. De chemische eigenschappen van het systeem en de concentraties worden opgegeven via een invoer file. Deze file is op dezelfde wijze opgebouwd als de invoer file voor STYXZG (commando's en parameterwaarden). Nadat een verspreidingsberekening is uitgevoerd is de berekening te controleren met behulp van een controle file. In deze file worden ook de eventuele foutmeldingen weggeschreven indien het programma vastloopt. Voor een uitvoerige beschrijving van de in- en uitvoer van STYXZ wordt naar de handleiding STYXZ verwezen (Bijlage B3). Er moet worden opgemerkt dat de redox- en de DOC-functionaliteiten nog niet binnen het CMT beschikbaar zijn. Ook kunnen geen dynamische transportsommen in het CMT uitgevoerd worden. Indien deze functionaliteiten gewenst zijn, zal buiten het CMT gewerkt moeten worden.

Een STYXZ-berekening is opgedeeld in tijdstappen. Deze zijn afhankelijk van de kortste verblijftijd die in het model aanwezig is. Indien de verblijftijd erg kort is (hoge stroomsnelheid, lage adsorptiecapaciteit, lage verdelingscoëfficiënt) zal de rekentijd fors oplopen. Bij grote modellen kan deze in de orde van dagen liggen. Indien een hoge rekentijd verwacht wordt, is het zinvol om de berekening in de batch mode in de avonduren (of in het weekend) uit te voeren.

Bij deze werkstap zijn de volgende drie opties beschikbaar:

'Invoer STYXZ'

De invoer van STYXZ is op dezelfde wijze opgebouwd als die voor STYXZG (commando's en parameterwaarden). Ook hier moeten de wijzigingen met een menu-gestuurde editor worden aangebracht. Deze heeft de volgende mogelijkheden:

- Deel 1: Titel
 Hier kan een titel van de berekening ingevoerd worden; het bijhorende STYXZ-commando is 'TITLE'.
- Deel 2: Eigenschappen verontreiniging
 In dit menu-onderdeel kunnen alle chemische eigenschappen van de verontreiniging ingevoerd worden. Bij NAMPOL kan de naam van de verontreiniging opgegeven worden, bij VERKOC de verdelingscoëfficiënt (in m³/kg) en bij THALF de halfwaardetijd in jaren. Voor een verdere toelichting van deze commando's wordt naar de handleiding van STYXZ verwezen.
- Deel 3: Chemie van het systeem
 Bij dit onderdeel kunnen de chemische eigenschappen van de verschillende onderdelen van het systeem opgegeven worden. De gegeven eigenschappen gelden voor alle segmenten in het systeem met dat eigenschapnummer. De informatie die opgegeven moet worden past bij het commando CHEMIS en is achtereenvolgens het eigenschapnummer, de porositeit, het organische stofgehalte en de dichtheid van de vaste fase (zie handleiding STYXZ).

- Deel 4: Vaste stofconcentraties
In dit menu wordt de informatie opgegeven die past bij het commando 'SOLPOL'. Dit betreft een aanduiding van de segmenten waarvoor de betreffende concentratie geldt, de waarde van de concentratie in massa/kg en een eventuele factor waarmee het volume van de betreffende segmenten moet worden vermenigvuldigd.
- Deel 5: Maximale opgeloste stof concentratie voor presentatie
In dit menu moet de maximale porienwaterconcentratie opgegeven worden. Deze waarde zal bij de presentatie van de berekeningen gebruikt worden. (commando CONMAX).
- Deel 6: Definitie rekenperiode en methode
Bij dit menu-item moeten alle zaken met betrekking tot de door te rekenen periode en het uitvoerinterval opgegeven worden. Het betreft de STYXZ-commando's TBEGIN, TIME, NPICTU en FCT.

Aanpassen include file

De hierboven beschreven 6 delen bevatten de meest algemeen gebruikte commando's van STYXZ. Er zijn echter nog veel meer opties beschikbaar. Deze kunnen met behulp van een editor aan de file toegevoegd worden bij deze menu-optie. Hierbij moet erop gelet worden dat de juiste formats gebruikt worden. Voor een toelichting bij de overige commando's wordt naar de handleiding van STYXZ verwezen.

Nadat de invoerfile is aangepast moet deze aangemaakt worden met de optie 'Aanmaken totaal bestand'. Dit moet altijd plaatsvinden nadat wijzigingen in de invoer zijn uitgevoerd. Indien gewenst kan de aangemaakte invoer-file bekeken worden met de optie 'Bekijken totaal bestand'. Het menu wordt verlaten met de keuze 'Return to CMT'.

'Bereken stoftransport'

Als STYXZ wordt gestart, zijn er twee schermen mogelijk, afhankelijk van de keuze die in de invoerfile is gemaakt. Indien de optie 'NOPICT' is ingesteld, zal alleen wat informatie over de tijdstappen en de geschatte rekentijd op het scherm verschijnen. Indien deze optie niet in de invoerfile voorkomt, zal op het scherm de verspreiding gedurende de berekening getoond worden voor de vlakken die in de invoerfile zijn gekozen. De schatting van de benodigde rekentijd, in minuten, wordt weergegeven achter de tekst 'est' (van 'estimated'). De tijd die reeds is verstreken, wordt achter de tekst 'time' weergegeven. Indien de rekentijd erg lang is, kan het soms even duren (tot tientallen minuten) voordat deze informatie op het scherm verschijnt.

De STYXZ-berekening kan worden afgebroken met het commando [ALT S]. In dat geval worden alle files netjes afgesloten en kan het berekeningsresultaat dat tot dan toe was weggeschreven gewoon bekeken worden. Als het programma met [CTRL C] wordt gestopt, zijn alle resultaten die tot dan toe waren weggeschreven verloren.

'Bekijk convergentie en controle'

Door STYXZ wordt één controle file en een 'uitloog file' weggeschreven. De controlefile is in principe hetzelfde opgebouwd als de controlefile van STYXZG. Dit betekent dat eerst een herhaling wordt gegeven van de ingevoerde commando's en parameterwaarden, gevolgd door informatie over het rekenproces. In de uitloog-file staat het verloop van de massa in het systeem in de tijd gegeven. Deze informatie kan gebruikt worden om bijvoorbeeld de uitloog van een depot te bepalen. Uitvoerige informatie over beide files wordt in de handleiding STYXZ gegeven.

6.4.6 Resultaten tonen

Voor de grafische naverwerking is in het kader van het nieuwe ORPHEUS een nieuw presentatieprogramma geproduceerd (STYXZMAP). Voor een overzicht van de functionaliteiten hiervan wordt verwezen naar de handleiding STYXZ (Bijlage B3). Ook de oude naverwerking (STYXZF) is in de handleiding opgenomen. Deze is echter niet in het CMT ingebouwd omdat de functionaliteit van de nieuwe naverwerking uitgebreider is.

Met het naverwerkingsprogramma kunnen de berekeningsresultaten in de vorm van dwarsdoorsneden (X, Y of Z) getoond worden. Hierbij kan de tijdas verschoven worden, zodat de verspreiding goed in de tijd is te volgen. Indien dit gewenst is, kunnen de resultaten direct geprint worden. Het is aan te bevelen de resultaten van een berekening altijd even te bekijken, alvorens over te gaan naar de getalsmatige analyse. Vaak kunnen fouten in de verspreiding met behulp van de grafische naverwerking snel opgespoord worden.

Bij deze werkstap is de volgende optie beschikbaar:

'Resultaten waterkwaliteit, grafisch'

Bij deze optie wordt het programma STYXZMAP gestart. De plaatjes die getoond moeten worden, kunnen vervolgens met behulp van keuzemenu's worden samengesteld. Er kunnen meerdere plaatjes tegelijk op het scherm getoond worden. Voor een uitvoerige beschrijving van het gebruik van STYXZMAP wordt naar de handleiding van STYXZ verwezen (Bijlage B.3).

6.4.7 Getalsmatige analyse met STYXZP

Bij de getalsmatige analyse worden de resultaten gekwantificeerd. Bij deze werkstap kunnen concentraties, massa's en fluxen voor de verschillende onderdelen van het model opgevraagd worden. Deze resultaten vormen vaak de basis voor de rapportage. Voor een volledig overzicht van de functionaliteit en het gebruik van STYXZP wordt naar de handleiding STYXZ verwezen (Bijlage B3).

Het programma STYXZP werkt binnen het CMT met een invoerfile. In principe kan ook zonder invoerfile gewerkt worden, maar deze mogelijkheid is niet in het CMT opgenomen. In de invoerfile moet opgegeven worden welke parameterwaarden er voor welke onderdelen van het systeem weggeschreven moeten worden. De getalswaarden kunnen vervolgens zichtbaar gemaakt worden en eventueel geprint worden.

Bij deze werkstap zijn drie opties beschikbaar:

'Maak invoer voor STYXZP'

Evenals bij de programma's STYXZG en STYXZ bestaat de invoerfile van STYXZP uit een lijst commando's met bijhorende waarden. De invoer is geheel afhankelijk van de opbouw van het model zodat geen 'standaard' opbouw gegeven kan worden. Voor een overzicht van de mogelijke analyses wordt verwezen naar de handleiding STYXZ (Bijlage B3).

'Numerieke analyse'

Als het programma STYXZP wordt gedraaid wordt op het scherm aangegeven welke stap doorlopen wordt en welk percentage van deze stap inmiddels is doorlopen. In principe verloopt de analyse zeer snel. Bij grote modellen kan de rekentijd oplopen tot enkele minuten.

'Bekijk analyse data'

Bij deze optie kunnen de resultaten van de analyse bekeken worden. Deze resultaten bestaan in het algemeen uit een lijst waarin voor elk tijdstip de waarde van de opgevraagde parameter wordt gegeven. In principe kan deze uitvoer eenvoudig omgezet worden in grafieken, of ingelezen worden in een spread-sheet voor een verdere verwerking. De uitvoermogelijkheid, die hiervoor nodig is, is echter nog niet in het CMT opgenomen.

6.5 Bijzondere zaken

Als de verspreiding van een stof in het grondwater met STYXZ wordt gemodelleerd, komen vaak dezelfde vragen naar voren. Deze zullen in deze paragraaf kort behandeld worden.

Hoe zit het met andere organische stoffen?

In het algemeen wordt met STYXZ de verspreiding van één organische verontreiniging gemodelleerd. Hiervoor wordt meestal een stof met een lage verdelingscoëfficiënt gekozen, zodat een betrekkelijk snelle verspreiding optreedt. De resultaten van deze berekening kunnen vertaald worden naar alle stoffen met een hogere verdelingscoëfficiënt, zolang deze hoger is dan $0.01 \text{ m}^3/\text{kg}$ vast fase. Bij een organisch koolstofgehalte van 5% oc moet de verdelingscoëfficiënt dus hoger zijn dan $0.2 \text{ m}^3/\text{kgoc}$ ($\log K_{oc} > 2.3 \text{ l/kg}$). De meeste organische verontreinigingen voldoen aan deze eis. De conversie van de berekeningsresultaten naar andere stoffen is toegestaan omdat de fractie opgelost bij een verdelingscoëfficiënt van meer dan $0.01 \text{ m}^3/\text{kg}$ vaste fase vrijwel lineair afhankelijk is van de verdelingscoëfficiënt.

Voor de conversie van de berekeningsresultaten moeten twee omrekeningen gemaakt worden: de tijdas en de concentratie. De verdelingscoëfficiënt van de rekenstof ('stof A') is hierbij gelijk aan $\text{VERD1 m}^3/\text{kg}$ en die van de gewenste stof ('stof B') is gelijk aan $\text{VERD2 m}^3/\text{kg}$.

De concentratie van de rekenstof is gelijk aan $CON1 \text{ mg/m}^3$ en die van de gewenste stof is gelijk aan $CON2 \text{ mg/m}^3$. Voor de conversie moeten nu de volgende factoren gebruikt worden:

tijd (stof B)	= $VERD2/VERD1 * \text{tijd (stof A)}$
concentratie (stof B)	= $CON2/CON1 * \text{concentratie (stof A)}$
massa (stof B)	= $CON2/CON1 * \text{massa (stof A)}$
flux (stof B)	= $((CON2/CON1)/(VERD2/VERD1)) * \text{flux (stof A)}$

Bij de conversie moet erop gelet worden dat zowel de tijdas als de concentratie aangepast moeten worden.

Kan de verspreiding van een conservatieve stof ook beschouwd worden?

STYXZ kan ook gebruikt worden om het transport van een conservatieve stof te bepalen. Dit is een stof die inert is en die geen interactie heeft met de ondergrond. Voorbeelden hiervan zijn zout, mogelijk DOC, ten dele arseen, tracerstoffen e.d. Om dit transport te kunnen bepalen moet aan de verdelingscoëfficiënt een zeer lage waarde worden toegekend, zodat de fractie opgelost vrijwel gelijk is aan 1.0.

Een probleem bij de berekening van de verspreiding van een conservatieve stof is dat de verblijftijd in het model erg laag wordt. Hierdoor zal STYXZ een zeer kleine rekentijdstap kiezen, zodat de rekentijden sterk oplopen. Het is dus aan te raden een niet al te uitgebreid model te gebruiken bij het bepalen van de verspreiding van een conservatieve stof.

Wat gebeurt er met de zware metalen?

Met betrekking tot het gedrag van zware metalen in een baggerspeciedepot kunnen twee groepen onderscheiden worden: de sulfidevormende en de niet-sulfidevormende zware metalen. De sulfidevormende zware metalen vormen een zeer slecht oplosbaar sulfideprecipitaat in gereduceerd milieu indien voldoende sulfide aanwezig is. Dit is in de Nederlandse specie eigenlijk altijd het geval. De sulfidevormende zware metalen zullen zich dus niet verspreiden zolang de specie gereduceerd is. De zware metalen die geen sulfide-precipitaten vormen (chromium en arseen) zullen zich ook in gereduceerd milieu kunnen verspreiden. Deze verspreiding is echter sterk afhankelijk van de chemie van het systeem (pH, adsorptiecapaciteit, ijzergehalte). Om de verspreiding van deze metalen te bepalen, is een uitgebreid chemisch model nodig (bijvoorbeeld CHARON) en moet voldoende informatie over de chemie van de ondergrond beschikbaar zijn.

Bij berekeningen met STYXZ wordt de verspreiding van zware metalen in het algemeen niet beschouwd, omdat vrijwel altijd gereduceerde depots worden beschouwd. Voor de bepaling van de verspreiding van arseen en chromium is in het algemeen onvoldoende informatie beschikbaar. Wel kan met STYXZ een indicatie verkregen worden over het gevaar van oxidatie van de specie in een depot als gevolg van het passeren van geoxideerd grondwater of van het infiltreren van zuurstofhoudend water. Hiervoor moet gebruik gemaakt worden van de redox-optie (zie handleiding STYXZ).

Kan er ook dynamisch gerekend worden?

De grondwaterstroming kan variëren in de tijd als er bijvoorbeeld onttrekkingen aan- of uitgezet worden. In principe kan deze situatie met STYXZ dynamisch doorgerekend worden. Hiervoor moeten verschillende waterbewegingen gebruikt worden, die achtereenvolgens door STYXZ worden ingelezen. Binnen het CMT is er (nog) geen mogelijkheid dynamisch te rekenen, omdat deze optie, door de lange tijdspanne die vaak wordt beschouwd, vrijwel nooit wordt toegepast.

Hoe wordt de consolidatieperiode in het model opgenomen?

De consolidatieperiode kan dynamisch in het model worden meegenomen. Omdat deze periode vaak echter kort is in vergelijking tot de beschouwde periode (100 jaar tegen 5000 of 10000 jaar), wordt deze meestal niet in de berekeningen opgenomen. Het extra transport dat in de consolidatie-periode optreedt, is meestal te verwaarlozen in vergelijking tot het totale transport. Indien de consolidatieperiode toch in het model moet worden opgenomen, moet dit gebeuren door een aantal verschillende waterbewegingen aan het model op te leggen.

BIJLAGEN

Bijlage A Generieke hulpmiddelen

Bijlage A.1 Begrippenlijst

Begrippenlijst

adsorbens	:	Een vaste stof die in staat is verbindingen uit een oplossing aan zijn oppervlak te binden.
adsorberen	:	Het verschijnsel dat vaste stoffen opgeloste verbindingen aan hun oppervlakte kunnen binden.
adsorptie	:	Het proces van adsorberen.
adsorptiecapaciteit	:	Het adsorberend vermogen van een vaste stof, uitgedrukt in massa geadsorbeerd per massa adsorbens (zie ook CEC).
advectief transport	:	Transport van stoffen doordat het water waarin ze zijn opgelost of gesuspendeerd, getransporteerd wordt ten gevolge van een potentiaalverschil (zie ook convectief transport).
aëratie	:	Beluchten, het transport van gassen uit de atmosfeer naar water.
aëroob	:	Zuurstofhoudend.
alg	:	Een in het water zwevende plant (zie ook fytoplankton).
alkaliteit	:	De overmaat OH^- ionen t.o.v. H^+ ionen in oplossing. In de meeste watersystemen is alkaliteit in de vorm van HCO_3^- aanwezig t.g.v. reactie met CO_2 . Alkaliteit wordt beïnvloed door oplossings- en precipitatiereacties ($\text{CaCO}_3 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Ca}^{++} + 2\text{HCO}_3^-$) en door sommige redoxreacties ($\text{SO}_4^{2-} + 2\text{CH}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{S} + 2\text{HCO}_3^-$).
amive	:	Anorganische microverontreinigingen.
anaëroob	:	Zuurstofloos.
anoxisch	:	Een milieu zonder oxydatoren; normaal wordt hier een zuurstof- en nitraatloos milieu onder verstaan. SO_4^{2-} , Fe^{3+} of CO_2 (methanogenese) zijn de oxydatoren.
aquatisch	:	Betrekking hebbend op water.
aromatische verbinding	:	Organische verbindingen die tenminste één benzeenring bevatten.
authigene mineralen	:	Mineralen die in het sediment zelf gevormd worden.
bacteriën	:	Eencellige organismen, die vooral belangrijk zijn bij de omzetting, van organische stoffen in hun componenten (zie mineralisatie).
bicarbonaat	:	De verbinding HCO_3^- (zie ook alkaliteit).
bioturbatie	:	Menging in de bodem door biologische activiteit (b.v. wormen).
BOD	:	Biological Oxygen Demand (identiek aan BZV).
BZV	:	Biologisch Zuurstof Verbruik (identiek aan BOD).
calciet	:	De vaste stof CaCO_3 , kalk.
calibratie	:	Het vaststellen van modelparameters door middel van ijking aan meetgegevens.
calibreren	:	Het proces van calibratie.
CEC	:	Cation exchange capacity: het adsorberend vermogen van een vaste stof (zie ook adsorptiecapaciteit).
chelaten	:	Organische verbindingen die complexen kunnen vormen met anorganische ionen.

vervolg begrippenlijst

chlorofyl	:	Een organische stof die voorkomt in fytoplankton, en aan de hand waarvan meestal fytoplanktonconcentraties bepaald worden.
COD	:	Chemical Oxygen Demand (identiek aan CZV).
coëfficiënt	:	Een getal dat in vergelijkingen wordt gebruikt en de intensiteit van een proces aangeeft, b.v. afbraakcoëfficiënt en sedimentatiecoëfficiënt.
colloid	:	Een gesuspendeerde vaste stof met zeer geringe afmetingen (< 0.45 micron).
complex	:	Een verbinding tussen enkelvoudige ionen ($\text{Cd}^{2+} + \text{HS}^- \rightarrow \text{CdHS}^+$)
complexatie	:	Het aangaan van complexe verbindingen.
complexerend	:	Het vermogen om complexe verbindingen te vormen.
component	:	Eenvoudige bestanddelen waaruit verbindingen kunnen worden gevormd. Ieder chemisch systeem kan opgebouwd gedacht worden uit een beperkt aantal componenten die een veelheid van verbindingen kunnen vormen (b.v. alle elementen van het periodiek systeem (103) kunnen een bijna oneindig aantal chemische verbindingen vormen).
concentratie	:	Een maat voor de hoeveelheid stof per volume. In de chemie worden meestal de eenheden gram/m^3 , mol/m^3 of molfractie gebruikt. Molfractie is het aantal molen van een stof op het totaal aantal molen in een fase.
conservatief	:	Een stof is conservatief, als alleen het transport bepalend is voor de optredende concentraties. Er treden geen chemische processen zoals precipitatie of adsorptie op, en de stof wordt niet afgebroken.
consolidatie	:	De zetting van een gestorte sliblaag, als gevolg van het eigen gewicht.
contaminant	:	Verontreiniging.
convectief transport	:	Zie advectief transport, in het oppervlaktewater wordt de term advectief transport gebruikt, in het grondwater convectief transport. Er is geen verschil.
CZV	:	Chemisch Zuurstof Verbruik (identiek aan COD).
denitrificatie	:	Het omzetten van nitraat in stikstofgas en gedeeltelijk in NH_4^+ . Dit proces verloopt alleen onder anaërobe omstandigheden. Ook in oppervlaktewater is het proces belangrijk, omdat nitraat naar de anaërobe bodem diffundeert, waar het gedenitrificeerd wordt.
desorptie	:	Het loslaten van geadsorbeerde verbindingen, het omgekeerde proces van adsorptie.

vervolg begrippenlijst

diagenese	:	De verandering van afgezette sedimenten onder invloed van (bio)chemische en fysische processen. Voor de chemische processen is de afbraak van organische stof de drijvende kracht. De processen die een rol spelen zijn vooral redoxreacties en oplos- en precipitatiereacties. Indien advectief transport plaatsvindt, kan ook afvoer van opgeloste verbindingen een belangrijk proces zijn.
diffusie	:	Het verschijnsel dat door moleculaire en/of turbulente bewegingen concentratiegradiënten ook in stilstaand water worden opgeheven. De opgeloste stof verdeelt zich in alle richtingen.
diffusiecoëfficiënt	:	De coëfficiënt die gebruikt wordt in de diffusievergelijking om het diffusieve transport van stoffen ten gevolge van een gradient te berekenen.
dionen	:	Afbraakproducten van PAK's bestaande uit een alkaanketen van variabele lengte, met eraan gebonden 2 zuurstofstromen.
dispersie	:	Het transport van stoffen als resultaat van advectie en moleculaire en turbulente diffusie, voor zover niet door de gehanteerde vergelijkingen beschreven. De grootte van de dispersie hangt dus af van de wijze waarop het systeem beschreven wordt. (B.v. bij een meer dat in drie segmenten wordt verdeeld, is de advectie het transport door de netto stroming tussen de segmenten. Het transport van stoffen ten gevolge van de stroming door windinvloeden, die geen netto watertransport teweegbrengt, wordt dispersie genoemd).
dissociatiereactie	:	De reactie waarbij een complex zich splitst in zijn samenstellende bestanddelen (b.v. $\text{HCO}_3^- \rightarrow \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$).
dissolutie	:	Oplossen van precipitaten.
DOC	:	Dissolved Organic Carbon.
ecosysteem	:	De verzameling van alle levende organismen, voorkomend in een bepaald systeem, met hun onderlinge relaties en de relaties met de dode omgeving.
ecotoxicologie	:	De wetenschap die zich bezig houdt met vergiftigingsverschijnselen in een ecosysteem.
Eh	:	Maat voor redoxpotentiaal.
electronacceptor	:	Een stof die electronen kan opnemen, een oxydator b.v. O_2 ($\text{O}_2 + 4\text{e}^- + 2\text{H}^+ \rightarrow 2\text{OH}^-$)
electrondonor	:	Een stof die electronen kan afgeven, een reductor.
electronen	:	Negatief geladen deeltjes die een onderdeel vormen van atomen. In reactievergelijkingen komen naast atomen, moleculen en ionen ook electronen voor ($2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2$). Zoals H^+ -ionen of protonen een essentieel onderdeel vormen in hydrolysereducties, zo vormen electronen een essentieel onderdeel bij redoxreacties.
eutroof	:	Goed van voedingsstoffen voorzien, de term wordt gebruikt voor meren die zo belast worden met nutriënten, zoals stikstof en fosfor, dat excessieve algengroei optreedt.

vervolg begrippenlijst

evenwicht	:	De situatie waarin geen verandering van toestandsgrootheden in de tijd optreedt.
exotherm	:	Energie leverend, bij een exotherme reactie komt warmte vrij.
fulvine	:	Groep van organische verbindingen die vooral gevormd wordt bij afbraak van organisch materiaal dat door fotosynthese is ontstaan.
Gibbs-energie	:	Een intrinsieke eigenschap van een stof. De verschillen in Gibbs-energie tussen stoffen reflecteren de verschillen in stabiliteit. Hoe lager de Gibbs-energie van een verbinding, des te stabiel is de verbinding. De Gibbs-energie (G) kan worden afgeleid uit twee ander intrinsieke grootheden: de enthalpie (H), de entropie (S) en de temperatuur (T) volgens: $G = H - T.S$. Gibbs-energiën zijn niet absoluut meetbaar, alleen verschillen tussen de Gibbs-energie van producten en reactanten bij een reactie zijn meetbaar.
gradiënt	:	De verandering van de waarde van een variabele in afstand of in tijd.
HCH	:	Hexa Chloor hexeen.
humus	:	Organische verbindingen die geproduceerd worden bij de afbraak van plantenmateriaal. Het zijn veelal macromoleculen die slecht afbreekbaar zijn.
hydrofoob	:	Watervrezend, verschijnsel dat organische stoffen slecht in water oplossen en zich bij voorkeur aan andere stoffen hechten.
hydrostatische druk	:	De druk door het gewicht van een kolom water.
hydroxyde	:	Een verbinding met OH^- (bijvoorbeeld: $\text{Fe}^{3+} + 3\text{OH}^- \rightarrow \text{Fe}(\text{OH})_3$)
initieel	:	Betrekking hebbend op de begintoestand.
interstitieel	:	Het er zich tussen bevindende, gebruikt voor water tussen de bodemdeeltjes.
kinetiek	:	De beschrijving van de snelheid van processen.
Koc	:	Organisch-koolstof partiticoëfficiënt
kooldioxide	:	De verbinding CO_2 .
ligands	:	Verbinding die complexen kan vormen, meestal met kationen.
log K	:	De logaritme van de evenwichtsconstante van een reactie.
log k_{sp}	:	De logaritme van het oplosbaarheidsproduct van een stof (bijv. van calcië).
lutum	:	Deeltjes $< 2 \mu\text{m}$.
mackinawiet	:	Verschijningsvorm van enigszins kristallijn FeS .
macrochemie	:	Die chemische processen die andere chemische reacties kunnen beïnvloeden.
macrocomponenten	:	De componenten die door hun hoge concentratie in staat zijn de chemische processen wezenlijk te beïnvloeden.
marien	:	Op de zee betrekking hebbend.
MER	:	De procedure voor de milieu effect rapportage

vervolg begrippenlijst

MER	:	Het Milieu Effect Rapport
meq	:	Afkorting van milligram equivalent, bij alkaliteit de hoeveelheid alkaliteit gelijk aan een milligrammol OH ⁻ .
methaan	:	De verbinding CH ₄ .
methanogenese	:	De vorming van methaan uit organische stof. Dit proces treedt op nadat oxydatoren als O ₂ , NO ₃ ²⁻ , SO ₄ ²⁻ , Fe ³⁺ zijn uitgeput. De reactie verloopt volgens: 2 CH ₂ O -> CO ₂ + CH ₄ .
microbieel	:	Teweggebracht door bacteriën.
microchemie	:	Die chemische processen die door de geringe kwantiteit van de deelnemende verbindingen niet in staat zijn andere chemische processen te beïnvloeden.
microverontreinigingen	:	Verontreinigingen die in lage concentraties voorkomen
mobiliteit	:	Beweegbaarheid of transporteerbaarheid, dit is afhankelijk van oplosbaarheid en advectieve of dispersieve stroming.
modelleren	:	Het met behulp van een model beschrijven van processen en/of relaties.
nitrificeren	:	Het omzetten van ammonium, NH ₄ ⁺ in nitraat, NO ₃ ⁻ . Deze reactie verloopt alleen in zuurstofhoudend milieu.
omive	:	Organische microverontreinigingen.
oxydatie	:	Een reactie waarbij electronen worden opgenomen. Deze reactie gaat altijd samen met een reductie.
oxydator	:	Verbinding die in een oxydatie-reductiereactie electronen opneemt (zie electronacceptor).
particulair	:	Materiaal dat zich in vaste deeltjes bevindt (gesuspendeerd).
partiticoëfficiënt	:	Verhouding tussen vaste-stofconcentratie en opgeloste stofconcentratie. De partiticoëfficiënt wordt gebruikt om bij lineaire adsorptie de vaste en opgeloste concentratie bij gegeven totaalconcentratie te berekenen (zie ook verdelingscoëfficiënt).
PCB	:	Poly Chloor Biphenyl.
PCP	:	Penta Chloor Phenol.
pH	:	Negatieve logaritme (grondtal 10) van de H ⁺ -ionenactiviteit. Maat voor de zuurgraad.
POC	:	Particulate Organic Carbon
poriënwater	:	Het water wat zich tussen bodem- of slibdeeltjes bevindt.
porositeit	:	Het gedeelte van het grond- of bodemvolume dat niet door vaste stof wordt ingenomen.
ppb	:	Afkorting voor parts per billion (deeltjes per miljard of 10 ⁻⁷ procent, b.v. microgram per kilogram).
ppm	:	Afkorting voor parts per million (deeltjes per miljoen of 10 ⁻⁴ procent, b.v. milligram per kilogram).
precipitaten	:	Vaste fasen die vanuit een oplossing zijn gevormd.
precipiteren	:	Het vormen van precipitaten.
quinonen	:	Afbraakprodukten van PAK's, bestaande uit een of meerdere benzeenringen, met eraan gebonden 2 zuurstofatomen.

vervolg begrippenlijst

reaëratie	:	Aëratie in natuurlijke systemen, de term aëratie wordt vooral voor kunstmatige beluchting toegepast.
redoxpotentiaal	:	Maat voor de oxydatietoestand, hoge redoxpotentiaal is oxyderend, lage redoxpotentiaal is reducerend. Het nulniveau is gedefinieerd als de toestand waarbij gelijke concentraties H^+ en H_2O aanwezig zijn.
redoxreacties	:	Reacties waarbij oxydatie en reductie een rol spelen.
reductie	:	De reactie waarbij elektronen worden afgegeven. Deze reactie gaat altijd gepaard met een oxydatiereactie.
respiratie	:	Ademhaling, het omzetten van organische verbindingen met zuurstof in kooldioxide, ten einde energie te verkrijgen.
resuspensie	:	Het vanuit de bodem opnieuw in suspensie gaan van vast materiaal.
saliniteit	:	Zoutgehalte, ook wel gebruikt om fractie zeewater aan te duiden.
sediment	:	De zich onder de waterkolom bevindende vaste bodem.
sedimenteren	:	Het bezinken van gesuspendeerd materiaal.
solid solution	:	In het kristalrooster van een bepaalde stof kunnen andere, stofvreemde ionen worden opgenomen. Hierdoor wijkt de chemische samenstelling van het kristal af van de samenstelling van de zuivere stof (bijv. Cd^{2+} wordt opgenomen in het kristalrooster van ZnS).
speciatie	:	Het voorkomen van componenten in verschillende verbindingen.
steady state	:	Schijnbare evenwichtssituatie. Toestand waarin de aanvoerende processen juist door de afvoerende processen gecompenseerd worden.
stratificatie	:	Het verschijnsel dat de waterkolom is opgebouwd uit twee of meer lagen met een verschil in dichtheid. Oorzaken zijn verschillen in zoutgehaltes, of in temperatuur. Over de verschillende lagen vindt sterk verminderde menging plaats.
sulfiden	:	Verbindingen met het negatiefgeladen zwavel-ion (S^{2-})
turbulentie	:	Wervels in het water die transport veroorzaken.
verdelingscoëfficiënt	:	Coëfficiënt die aangeeft hoe een opgeloste verbinding zich over vloeistof en vaste stof, waaraan de verbinding kan adsorberen, verdeelt (eenheid: mg/kilogram ads. mg/liter opl. > liter/kilogram) (zie ook partiticoëfficiënt).
worst case	:	Een benadering bij modelleren, waarbij niet getracht wordt de echte toestand te berekenen, maar de slechtst mogelijke toestand. Voor O_2 betekent dit veelal de laagst mogelijke concentratie, terwijl voor toxische stoffen dit de hoogst mogelijke is. Deze benadering wordt toegepast als er grote onzekerheid over de invoergegevens bestaat, waarbij dan de slechtst mogelijke combinatie wordt gekozen. Als de resultaten van deze modelberekeningen geen problemen opleveren, kunnen ondanks de onzekerheden toch veilige conclusies worden getrokken.

Bijlage A.2 Beslissings-ondersteunende Systemen (BOS)

A.2 Beslissings-Ondersteunende Systemen (BOS)

I Inleiding

Deze bijlage heeft tot doel om de ontwikkeling en toepassing van beleidsondersteunende systemen voor het waterkwaliteitsbeheer te plaatsen binnen het proces van beleidsvoorbereiding. Daarbij wordt ingegaan op de rol die een BOS kan spelen binnen het proces van beleidsvoorbereiding, de typen gebruikers die kunnen worden onderscheiden en de eisen die deze gebruikers stellen.

Voorts heeft deze bijlage tot doel het concept van een BOS te introduceren, d.w.z. aan te geven uit welke subsystemen (componenten) een BOS bestaat en wat de functionaliteit is van de verschillende componenten.

Tenslotte wordt een aantal begrippen nader geïntroduceerd ten behoeve van de structurering van de met het BOS uit te voeren analyses.

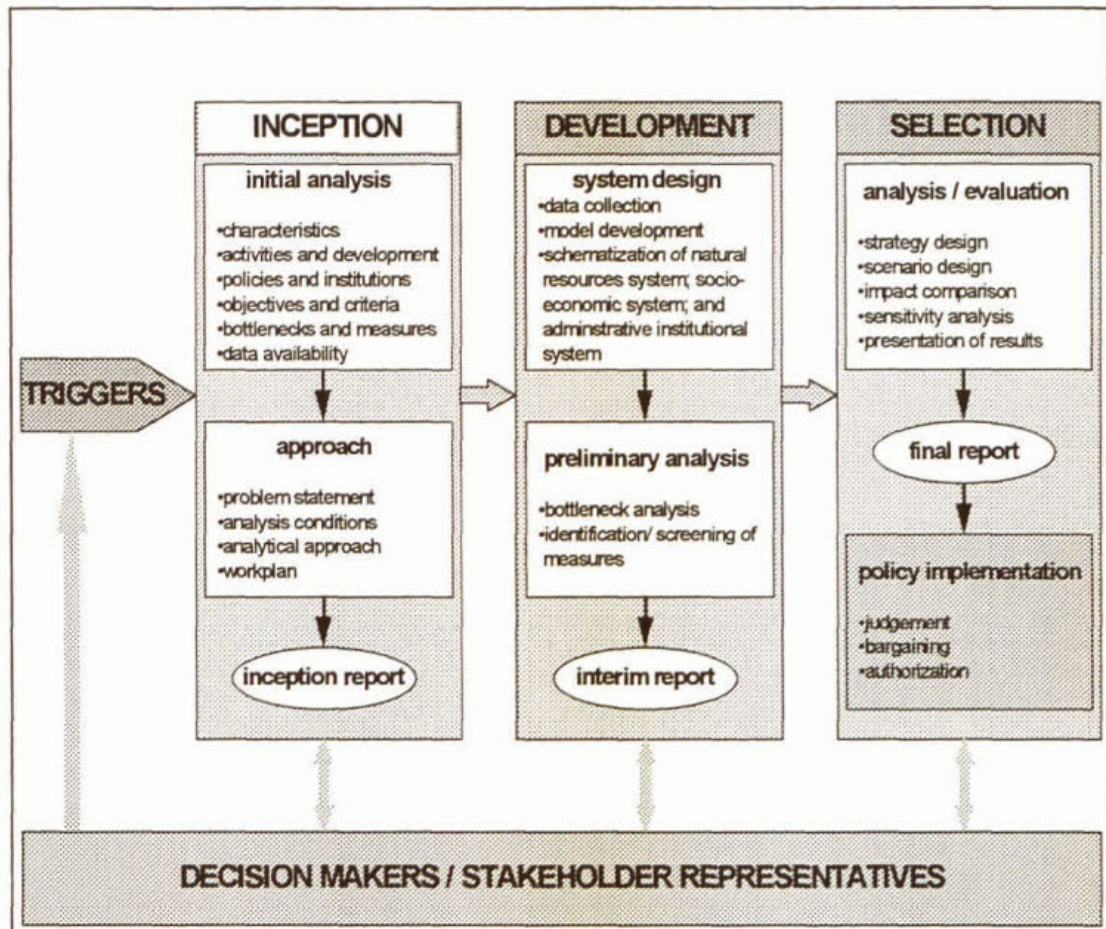
- de werkwijze binnen een beleidsanalyse van het waterbeheer (hoofdstuk 2)
- de rol van een BOS binnen een beleidsanalyse (hoofdstuk 3)
- de typen gebruikers van een BOS en hun eisen (hoofdstuk 4)
- de opbouw van een BOS: user-interface en subsystemen (hoofdstuk 5)
- de structurering van analyses en de vrijheidsgraden van de gebruiker (hoofdstuk 6)

2 Beleidsanalyse van waterbeheer en -beleid

In de werkwijze van beslissingsondersteuning ten behoeve van waterbeheer en -beleid kunnen enkele algemeen van toepassing zijnde lijnen worden onderkend. Het proces wordt begonnen met het definiëren van probleemstelling en doelstellingen, vervolgens worden alternatieve oplossingen ontwikkeld en beoordeeld, en tenslotte wordt een keuze gemaakt uit de beschikbare alternatieven al dan niet na consultatie van en onderhandeling met betrokken partijen. De uitvoering van dit proces heeft veelal een iteratief karakter, waarbij regelmatig terugkoppeling plaatsvindt op eerdere stappen.

De werkwijze kan treffend worden geïllustreerd aan de hand van de methodiek van een beleidsanalyse. Beleidsanalyse wordt daarbij gedefinieerd als een systematische en gestructureerde aanpak voor het genereren van de gewenste informatie voor het besluitvormingsproces. De beschrijving van de verschillende fasen, de activiteiten binnen deze fasen en de interacties tussen deze activiteiten wordt wel aangeduid als het 'Framework for Analysis'. Binnen het 'Framework for Analysis' (zie Figuur 1) kunnen drie fasen worden onderscheiden: de inceptiefase, de ontwikkelingsfase en de selectiefase.

In de *inceptiefase* wordt een probleemanalyse uitgevoerd en worden doelstellingen en criteria vastgesteld. Het onderwerp en het doel van de studie worden nader gespecificeerd, alsmede de randvoorwaarden voor de studie. Daarnaast wordt op basis van een eerste analyse de verdere aanpak van de beleidsanalyse gedefinieerd. Bij deze eerste analyse behoort een globale inventarisatie van maatregelen en scenario's die in de studie nader geanalyseerd moeten worden.



Figuur 1 Framework of Analysis

In de *ontwikkelingsfase* wordt vervolgens de informatie verzameld en de instrumenten ontwikkeld die nodig zijn voor het bepalen van de effecten van mogelijke maatregelen en scenario-ontwikkelingen. Gegevensverzameling en modelontwikkeling zijn de kernactiviteiten in deze fase. Gedurende de ontwikkelingsfase neemt het begrip van de problematiek van het studiegebied geleidelijk toe. Begonnen wordt met beperkte datasets en eenvoudige instrumenten, die waar nodig worden uitgebreid of vervangen door gedetailleerdere datasets of ingewikkelder modellen. Tussentijdse analyses moeten ervoor zorgen dat de mate van diepgang van de verschillende onderdelen van de studie met elkaar in evenwicht is.

In de *selectiefase* wordt een beperkt aantal veelbelovende strategieën gegenereerd, die na een gedetailleerde effectbepaling aan de beleidsmakers worden gepresenteerd. Alvorens de veelbelovende strategieën kunnen worden vastgesteld dient veelal een groot aantal cases te worden geanalyseerd. Het screenen van maatregelen, het formuleren en evalueren van strategieën, het uitvoeren van gevoeligheidsanalyses en het presenteren van analyseresultaten zijn belangrijke activiteiten in deze fase.

3 Gebruik van BOS binnen beleidsanalyse

3.1 Uitvoering van kwantitatieve analyses met behulp van modellen

Een belangrijke ontwikkeling in het beleidsvoorbereidend onderzoek is het toegenomen gebruik van kwantitatieve analyses. Verschillende aspecten van een watersysteem worden in model gebracht om het systeemgedrag onder uiteenlopende omstandigheden te kunnen analyseren. Met de toegenomen rekenkracht van computers is de complexiteit van de in de modellen beschreven processen en relaties steeds verder toegenomen, evenals het detailniveau ten aanzien van tijd en ruimte. Ook het gebruik van modellen heeft zich verbreed; het is niet meer beperkt tot de (oorspronkelijke) ontwikkelaars. Visualisatie van modelresultaten is een voorwaarde geworden om te kunnen beoordelen of uitkomsten van een simulatie betekenisvol zijn of niet. Tegelijkertijd neemt de behoefte toe aan het op een gerichte manier condenseren van de veelheid aan gegenereerde informatie.

Het toepassen van een set modellen vergt een groot aantal handelingen van de analist: invoergegevens moeten worden gewijzigd, modellen gerund, simulatie resultaten bestudeerd en opgeslagen om te worden vergeleken met andere gevallen, etc.. In een dergelijke situatie is het essentieel, dat de analist een goede kennis heeft van de aard en inhoud van de modellen en hun databestanden. Daarbij gaat in het algemeen veel tijd zitten in het voorbereiden/administreren van analyses, waardoor minder tijd resteert voor de feitelijke analyse en interpretatie. Daarnaast kunnen, tenzij zeer nauwkeurig en met grote discipline wordt gewerkt, fouten sluipen in een analysegang, waardoor uiteindelijk het aantal bruikbare analyseresultaten beperkt blijft.

De ontwikkeling en toepassing van beleidsondersteunende systemen beoogt het proces van informatievoorziening ten behoeve van de beleidsvoorbereiding beter te stroomlijnen, zodanig dat daadwerkelijk een groot aantal cases kan worden geanalyseerd. Het betreft een aantal ontwikkelingen die zich laat samenvatten in termen van integratie, kwaliteitsborging en gebruikersgemak.

3.2 Typen van beleidsondersteunende systemen

Gelet op de betrokken actoren, hun rol en kennis, en gelet op de werkwijze bij beleidsvoorbereidende studies kan bij een BOS voor beleidsvoorbereiding de volgende functionele indeling in drie fasen worden aangehouden:

- *Probleemanalyse en diagnose.* In de inceptiefase wordt gepoogd structuur aan te brengen in het beleidsprobleem. Het BOS biedt ondersteuning bij het nader definiëren en specificeren van het beleidsprobleem en het beoogde product van de beleidsanalyse. Een eerste orde vaststelling welke aspecten geanalyseerd moeten worden en in welke mate van detail.

- *Analyse en evaluatie van alternatieven.* Het BOS biedt ondersteuning bij het genereren, analyseren en evalueren van (een groot aantal) mogelijke alternatieven voor de oplossing van het gestelde beleidsprobleem. Het BOS wordt gebouwd in de ontwikkelingsfase van een beleidsanalytische studie. De ontwikkeling van het BOS heeft een duidelijk incrementeel karakter. Het 'definitieve' BOS wordt in de selectiefase van de beleidsanalyse toegepast om een groot aantal cases te analyseren en evalueren.
- *Ondersteuning van beleidskeuze.* Het BOS kan worden toegepast in de fase van advisering, voorlichting en inspraak die volgt op de beleidsanalytische studie. Het BOS beoogt beleidsmakers en belanghebbenden snel inzicht te geven in de aard en omvang van het beleidsprobleem en een overzicht te geven van de consequenties van mogelijke oplossingsrichtingen.

Met het BOS voorbereide cases kunnen worden benut bij de communicatie met beleidsmakers en belanghebbenden ter ondersteuning van de beleidskeuze.

4 Typen gebruikers van een BOS en hun eisen

4.1 Verschillende niveaus van gebruikers

Er zal veelal sprake zijn van verschillende niveaus van gebruikers van een BOS. Gelet op de aard van de betrokkenheid van actoren bij de ontwikkeling en het gebruik van een BOS kan onderscheid worden gemaakt tussen het management niveau, het (beleids)voorbereidende, integrerende niveau en het meer specialistische ontwikkelingsniveau.

Het onderscheid in niveaus van gebruik leidt tot de volgende indeling in drie 'ideaal'-typen van eindgebruikers, te weten:

- *De beleidsmaker / belanghebbende.* Het betreft de gebruikers die het BOS benutten om de beleidskeuze te ondersteunen. Het BOS wordt gebruikt om bijvoorbeeld in het kader van een begeleidingscommissie de belangrijkste kenmerken en effecten van reeds voorbereide alternatieven te demonstreren en nader te evalueren. Daarnaast kan het zijn, dat het BOS wordt gebruikt in sterk interactieve sessies ('management games'), in welk geval snelle responstijden van het systeem een vereiste zijn.
- *De beleidsanalist / beleidsmedewerker.* Het betreft gebruikers die het BOS benutten voor het definiëren, analyseren en evalueren van alternatieven (cases). De analyse betreft in beginsel alle processen en relaties die binnen het systeem beschreven worden. Het accent in het gebruik ligt op het ontwikkelen van een aantal veelbelovende strategieën en de integratie van de beschikbare (gegenereerde) informatie tot een samenhangend overzicht van de effecten van de verschillende alternatieven.
- *De specialist.* Het betreft gebruikers die het BOS benutten voor meer gedetailleerde analyses; veelal van slechts een deel van het totale systeem. De specialist zal, in samenwerking met de beleidsanalist, het BOS ook 'tussentijds' gebruiken gedurende de ontwikkelingsfase om het detail-niveau van het BOS te optimaliseren binnen de randvoorwaarden van tijd en budget.

De ondersteuning van de beleidsanalist / beleidsmedewerker betreft zowel het uitvoeren van (integrale) analyses als de communicatie met beleidsmakers / belanghebbenden resp. met specialisten. Vaak bevat een BOS eveneens een aantal onderdelen die van belang zijn voor de meer specialistische gebruiker, zoals bijvoorbeeld hulpmiddelen voor de calibratie en verificatie van de simulatiemodellem.

4.2 Eisen aan BOS vanuit verschillende typen gebruikers

Het type gebruiker is bepalend voor de gebruikerseisen die aan het BOS moeten worden gesteld. Dit geldt in het bijzonder voor de responsnelheid van het systeem en de presentatie van opties en resultaten.

Responsnelheid van systeem

Voor gebruikers van het type beleidsanalist / beleidsmedewerker geldt dat deze hun cases op een plezierig interactieve manier moet kunnen definiëren en de resultaten nader moeten kunnen analyseren. Voor het genereren van de basismodelresultaten kan een langere responstijd worden geaccepteerd. Voor de gebruikers op het management niveau is een goede responsnelheid van het systeem van groot belang.

De rekentijd van de in het BOS opgenomen modellen is afhankelijk van de gebruikte hardware (processor) en de doorgerekende periode. De rekentijd loopt uiteen van enkele tientallen seconden tot enkele tientallen minuten. De snelheid waarmee de opzet en de resultaten van reeds voorbereide cases kan worden gepresenteerd is voldoende om goed interactief te kunnen werken. In die zin sluit het ontwikkelde BOS aan bij de gebruikerseisen van de beleidsanalist/beleidsmedewerker. Tevens kan het BOS goed worden ingezet bij de communicatie met beleidsmakers / belanghebbenden ten aanzien van de effecten van reeds voorbereide cases. De responstijd van de modellen zal doorgaans te lang zijn om het BOS effectief te kunnen inzetten op het management-niveau ten behoeve van het on-line doorrekenen van nieuwe cases.

Presentatie van opties en resultaten

Voor het management-niveau gaat het er vooral om de beschikbare opties op een heldere en inzichtelijke wijze te kunnen tonen, en de effecten van geanalyseerde cases op een geïntegreerde wijze te kunnen presenteren in beleidsrelevante grootheden. Voor een beleidsanalist / beleidsmedewerker is het voorts van belang om zelf nieuwe opties te kunnen definiëren en de analyseresultaten nader te kunnen bewerken en condensereren tot het gewenste formaat voor presentatie aan het management-niveau.

Het ontwikkelde BOS bevat goed voorzieningen voor de beleidsanalist / beleidsmedewerker voor het aanpassen en aanvullen van de bouwstenen van een beleidsanalyse: maatregelen, strategieën, scenario's en systeemaannamen. Het BOS is dusdanig opgezet dat een gestructureerde toepassing ten behoeve van beleidsanalyses wordt ondersteund.

Tevens bevat het BOS een aantal mogelijkheden voor de analist om de berekeningsresultaten van verschillende cases nader te bewerken en te condensereren tot beleidsrelevante overzichten. Op dit punt is evenwel een verdere ontwikkeling gewenst.

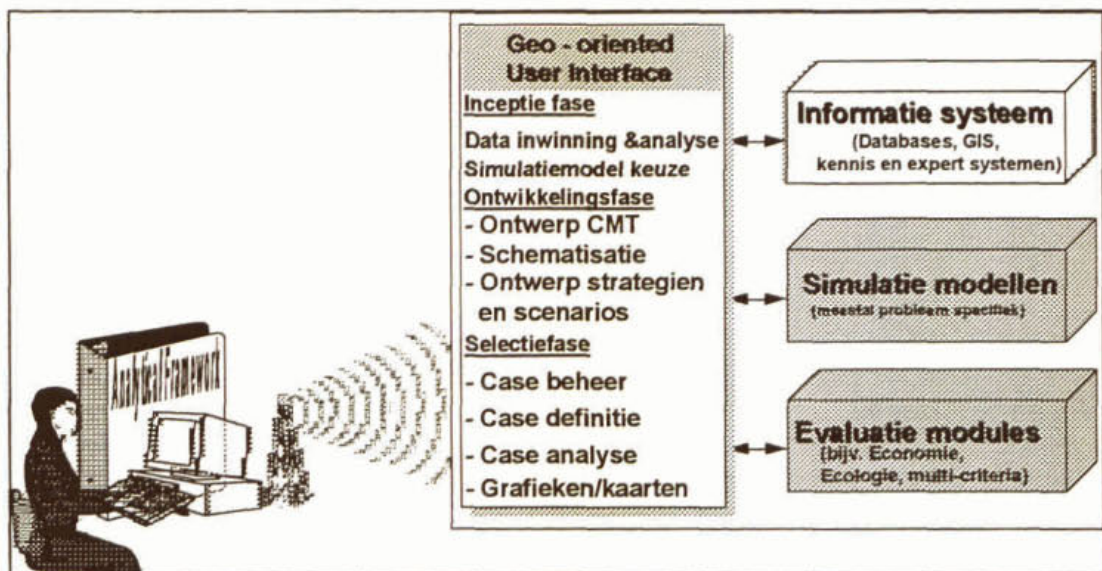
5 Concept van een BOS

In de opzet van een decision support systeem kan onderscheid worden gemaakt tussen de user-interface en een drietal subsystemen, te weten een informatiesysteem, een geïntegreerd modelsysteem en een analysesysteem. De opbouw van het BOS en de samenhang tussen de verschillende onderdelen is schematisch getoond in Figuur 2. Het doel en de inhoud van de user-interface en de onderscheiden subsystemen wordt hieronder kort beschreven.

6 User-interface

Algemene opzet

De (grafische) user-interface van het BOS vormt de verbinding met de gebruiker. De user-interface ondersteunt de procesgang binnen een beleidsanalytische studie (van probleemdefiniëring tot aan evaluatie van strategieën). De user-interface levert tevens de aansturing van de verschillende tools voor het bewerken van de data. Grafische presentatie van gegevens vormt een belangrijk onderdeel van de user-interface. Daar veel informatie ruimtelijk gebonden is, kent de user-interface een zoveel mogelijk geografische georiënteerde opzet.



Figuur 3.2 Opbouw van een bos

6.1 Informatiesysteem

Algemene opzet

De kern van een informatiesysteem is een database met gegevens van het studiegebied. Het informatiesysteem kan daarnaast een GIS bevatten voor eenvoudige invoer, bewerking en presentatie van ruimtelijke gegevens. Voorts kan het informatie systeem een 'rule and knowledge base' bevatten, met daarin bijv. informatie over normen, ecologische profielen en andere referentie informatie.

Het informatiesysteem wordt benut voor het beschrijven van de huidige situatie in het studiegebied en de situatie in het verleden. Het informatie systeem bevat de noodzakelijke gegevens voor het opzetten van de schematisatie van de rekenmodellen, en de calibratie en validatie van deze modellen. Het informatiesysteem kan tevens benut worden voor het monitoren van de toekomstige situatie.

6.2 Geïntegreerd modelsysteem

Algemene opzet

Een geïntegreerd modelsysteem bestaat uit een aantal samenhangende modellen; de keuze van modellen wordt bepaald door het type watersysteem en de aard van de studie. Er is onderscheid te maken tussen watersysteemmodellen en gebruiksfunctiemodellen.

- Gebruiksfunctie modellen beschrijven de eisen aan en de effecten op de toestand van het natuurlijk systeem (bijv. de lozing van stoffen vanuit de industrie). Daarnaast zijn er gebruiksfunctie modellen, die het effect beschrijven van een bepaalde toestand van het natuurlijk systeem op de betreffende gebruiksfunctie (bijv. het effect van waterkwaliteit op visproductiviteit).
- Watersysteem modellen beschrijven de fysische, chemische en biologische processen binnen het natuurlijk systeem. Het betreft fenomenen als de waterbeweging, eutrofiëring, kustmorfologie, e.d.

Bij het ontwikkelen van een geïntegreerd modelsysteem is het van belang dat in- en uitvoer van modellen goed op elkaar aansluiten. Verschillen in tijdschaal (dynamiek) en ruimtelijk aggregatieniveau vergen veelal een conversie van de modeluitvoer alvorens deze kan dienen als invoer voor een volgend model.

6.3 Analysesysteem

Algemene opzet

Een decision support systeem wordt toegepast voor het analyseren van cases. Met behulp van het analysesysteem kan een gebruiker verschillende cases (combinaties van strategieën, scenario's, e.d.) definiëren. Voor deze cases kunnen met behulp van het modelsysteem de effecten worden bepaald en tenslotte kunnen de resultaten van cases worden geanalyseerd en geëvalueerd.

Om de aantrekkelijkheid van alternatieve strategieën te bepalen dient doorgaans een groot aantal cases te worden geanalyseerd. Omdat modellen veelal een grote hoeveelheid berekeningsresultaten genereren is er behoefte aan een omgeving waarbinnen deze uitvoer kan worden gecondenseerd en geaggregeerd, bijv. in de vorm van samenvattende 'score-cards'. Dergelijke score-cards kunnen op hun beurt weer het vertrekpunt vormen voor een multi-criteria evaluatie.

7 Structurering van analyses in een BOS

7.1 Bouwstenen binnen een beleidsanalyse

Een beslissingsondersteunend systeem is erop gericht om allerlei mogelijke situatie te analyseren; deze situaties worden aangeduid met cases. Onder een case wordt in dit verband verstaan een volledig gespecificeerde analyse situatie; dat wil zeggen dat in een case precies is gedefinieerd welke modellen worden/zijn gerund en wat de daarbij behorende invoer en uitvoer is.

Een beleidsanalyse is erop gericht de effecten in beeld te brengen van alternatieve strategieën voor de oplossing van een bepaald beleidsprobleem. Daarbij is van belang inzichtelijk te maken in hoeverre deze effecten afhangen van een bepaalde externe ontwikkelingen en randvoorwaarden (scenario's) en in hoeverre de effecten worden beïnvloed door onzekerheden intern het beschouwde systeem (systeemaannamen). Ten behoeve van beleidsondersteunende systemen is het dan ook zinvol de definitie van een case (en daarmee de invoer van modellen) te structureren in een aantal categorieën, te weten: strategieën, scenario's en systeemaannamen.

Strategieën.

Een strategie bestaat uit een reeks maatregelen, die de verantwoordelijke waterbeheerder kan treffen. Het betreft ingrepen in het watersysteem en/of de ermee verbonden gebruiksfuncties, waarvoor de waterbeheerder verantwoordelijkheid draagt. Voorbeelden van maatregelen zijn het aanpassen van processen in de industrie, het verleggen van effluentleidingen van RWZI's en het baggeren en storten van sediment.

Scenario's.

Een scenario bestaat uit een reeks scenario-variabelen. Deze scenario-variabelen hebben betrekking op externe ontwikkelingen en randvoorwaarden die van invloed zijn op de toestand of het gedrag van het watersysteem en waarop de verantwoordelijke waterbeheerder geen directe invloed kan uitoefenen. Voorbeelden van scenario-variabelen zijn de omvang van de economische ontwikkeling of de grootte van de zeespiegelrijzing ten gevolge van klimaatverandering. Per scenario-variabele kunnen verschillende opties bestaan; bijv. een lage, een gemiddelde en een hoge economische groei. Ook verschillende milieumaatregelen die buiten de directe verantwoordelijkheid van de waterbeheerder vallen kunnen tot de scenario-variabelen worden gerekend.

Systeemaannamen

Een set van systeemaannamen bestaat uit een reeks van systeemaannamen ten aanzien van uitgangspunten c.q. onzekerheden in het gemodelleerde systeem. Het gaat veelal om onzekerheden in de gehanteerde schematisering, die in aanmerking komen voor de uitvoering van een gevoeligheidsanalyse.

A.3 Decision support system shell program

1 SHELL manual summary

This manual is meant to provide information on the use of the SHELL program. The primary purpose of the program is to run other programs from the SHELL menu. In this way SHELL can help you organize your computer and your Delft decision support system. SHELL is a Microsoft WINDOWS 3.1 executable program and can only be run from WINDOWS. It is programmed in the Visual Basic computer language.

You will learn how to use the SHELL program in chapter 2. The definition of the programs to be run and other optional settings is located in the SHELL.INI file. By changing this file you can change the SHELL settings, even while running the SHELL program. Chapter 3 will tell you how to specify special options for running programs and chapter 4 will tell you how to work with different languages in the SHELL program.

2 Using SHELL

Installation of SHELL

Installation of the SHELL program involves copying the following files

1. SHELL FILES
 - WL_SHELL.EXE = executable program
 - SHELL.INI = file with settings for the menus and screen objects
 - SHELL.LNG = file with the language information

2. VISUAL BASIC run time libraries
 - VBRUN300.DLL = visual basic source dynamic link library
 - THREED.VBX = Three dimensional screen objects dynamic link library

The language FILE SHELL.LNG should be in the same directory as the executable program. SHELL.INI can be in any directory, but if it is not in the same directory as the executable then the directory must be specified in the command line.

The VISUAL BASIC libraries have to be in the path of the PC or in the WINDOWS System directory. The installation of the SHELL program is automatically included in the installation program of the entire set of the Delft decision support system.

Starting the shell program

The Command Line syntax for starting the SHELL program is:

```
{program directory}WL_SHELL.EXE {Ini file directory} {0|1}
```

Where:

{program directory}	=	directory where the shell program is located, for example d:\hron\.
WL_SHELL.EXE	=	name of the SHELL executable program
{Ini file directory}	=	directory where the SHELL.INI file is located, the default value is the directory in which the WL_SHELL.EXE program is located.
{0 1}	=	language number: first language = 0; second = 1

To start the shell program in windows the following methods are possible:

1. Choose **File Run** from the **PROGRAM MANAGER** menu and enter for example **D:\HRON\WL_SHELL.EXE D:\HRON 1**. After enter is pressed the program will run.
2. Create a **PROGRAM MANAGER** item in a program group to start the shell as a program manager icon: After selecting a program group, choose **File New Program Item** and press **OK**. A dialog box appears.

>> Now fill in the dialog box:

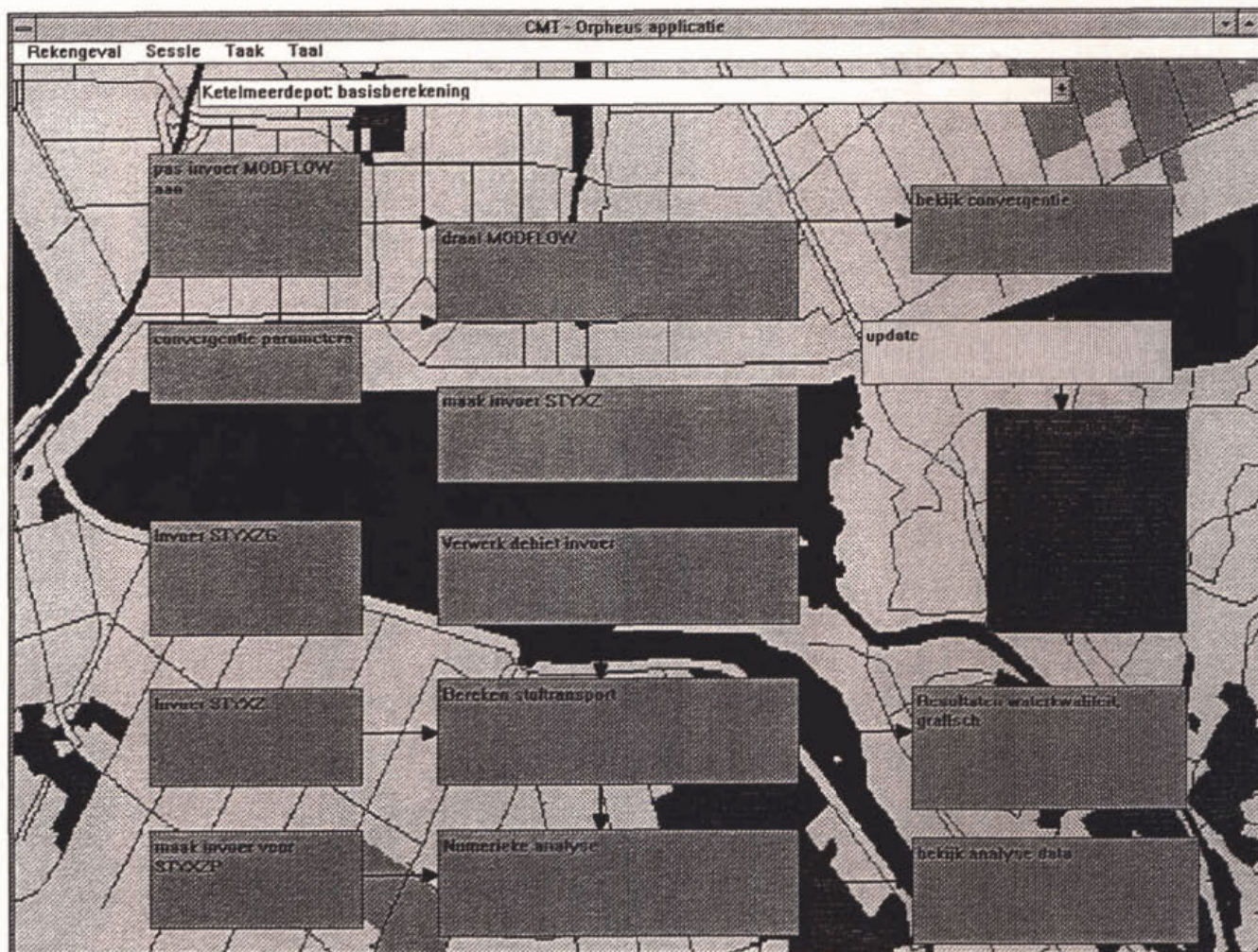
1. Enter the description for example **Database Shell**;
2. Enter the command line for example:
D:\HRON\WL_SHELL.EXE D:\HRON 1;
3. Enter a working directory; and
4. press **OK**.

Now an icon will appear in the program group and you can run the program by double clicking the icon.

3. Use the file manager to go the [program directory], select **WL_SHELL.EXE** and press enter to start the program. For this to work the **SHELL.LNG** and the **SHELL.INI** must be in the [program directory]. The language will be the default language.

Selecting programs to run from the shell

After starting the program with the sample shell.ini the screen will like look like for example like Figure A.1. Screen objects usually are activated by clicking on the object with the mouse or by using short-cut keys in the case of menu items. In the shell program there are two types of screen objects that will run programs. These are the (sub-)menu items and the icons. A description of screen objects and the possible user-interaction is given below:



Figures A.1 CMT grondwater

Screen objects of the shell program

Control menu box:

If you click on this box the Control menu is shown. This is a menu that contains commands you can use to manipulate the window. To open the Control menu, you choose the Control menu box at the left of the title bar in a window, or you can select an application icon at the bottom of the desktop.

Size Buttons:

For resizing the window, there are three buttons that are activated by clicking:

- Minimize button: to minimize the window (down arrow)
- Maximize button: to maximize the window (up arrow)
- Restore button: to restore the window to its normal size (up and down arrow)

Window Title:

The title bar of the programme. The title is specified in the file SHELL.INI. You can drag (move) the window to the desired position by pointing at the window title bar and moving the mouse while simultaneously pressing the left mouse button.

Main menu items:

The items of the main menu specified in SHELL.INI. You can select a menu item by clicking with the mouse, or by using the Alt key with the letter which underlined. For example, you can use [Alt]+[D] for a menu item marked with Dxxx. In the SHELL program this will cause a sub-menu to appear. From the sub menu you can select an item with the mouse or with arrow keys. This will run the program specified in the SHELL.INI file

Icon:

A pictograph and name that describe the program that will be run by clicking on the icon with the mouse.

Background picture:

A picture that will used as background for the SHELL window. It can be specified in the SHELL.INI FILE. Default is a WINDOWS metafile that shows the logos of the client (HRON) and the companies in the consultants for the study. The file that contains the logos is called allogos.wmf. No user interaction is possible with this object.

Status line:

A line on the bottom of the screen gives information on the last action taken by the program. No user interaction is possible with this object.

Beware of the multitasking trap!

When a program is started it will get the focus from WINDOWS, that is the program will be in the foreground and visible on the screen. If this program covers the whole screen the SHELL window will no longer be visible. However it will still be running, since WINDOWS is a tasking operating system. If the selected program is finished, then the SHELL will be shown again. After that you can the start the next program. In this way programs are run one by one.

It is possible to run more than one program at the same time. To do this you have to switch to the SHELL by pressing [Alt] + [Tab] while the selected program is running. From the SHELL you can then start a second program before the first program is finished running. In the same way you can start a third program and so forth. For programs that are completely independent of each other this works fine. However, it is very important to understand that all the programs you select in this way will run at the same time. Especially dangerous is the situation where the second program you start needs input from the first program that you started. The problem is that you don't know when the first program has finished preparing the input files for the second program. So when you start the second program while the first program is still running it may be using an input file which is out of date, or which is already opened. This may cause a file sharing error. To run programs after each other DELFT HYDRAULICS has developed the Case Management Tool cmt. Please refer to chapter on the Case Management Tool for more information.

Settings of the SHELL program in SHELL.INI

The SHELL.INI file is organized in chapters that can be recognized by a [keyword] entry. Under the [keyword] line a list of properties will appear with settings after the = character. It is not obliged to have all possible properties in the file. If a property or chapter is missing then the built-in defaults will be used by the SHELL program. A typical INI file will look like:

```
[keyword1]
property1 = settingA
property2 = settingB
property3 = settingC
property4 = setting D
```

```
[keyword2]
property2 = settingE
property3 = settingF
property4 = settingG
property5 = settingH
property6 = settingI
```

In the SHELL.INI the following chapters can be found:

[ShellForm]	Definition of settings for the SHELL window itself
[IconGallery]	Definition of settings for the Icons on the SHELL window
[Menu 0 Items]	Definition of settings for the menu items off the SHELL window

The settings that can be used for these chapters are described in the following chapters.

Options for the settings of the SHELL window

The following properties can be set in the [frmShell] chapter:

NameOfShell=**name**

name is a string that will appear as the title of the SHELL window. The string may contain a description for multiple languages (see chapter 4)

CurrentDir=**directory**

directory is the directory that is used as default directory to run a program. The default value is the SHELL.INI file directory.

Editor=**default editor**

default editor is the command line for the default editor that will be used when you specify Runs = \$Edit

WindowState=**number**

number is the number that sets the state of the window: 0=normal; 1=minimized; 2=maximized

WindowPosition=**top, left, width, height**

top, left, width, height are the settings in twips (a Visual Basic unit) for the normal window state for the top, the left, the width and the height of the SHELL.

Background=**picture file**

picture file is the file that contains the picture that you want to have as a background for the SHELL window.

Logo=**logo picture file**

logo picture file is the file that contains the picture that you want to show in addition to the background. The position of the logo picture is controlled by the "Logo X pos" and the "Logo Y pos" properties.

Logo X pos= **X twips**

X twips is the number of twips (a Visual Basic unit) in the horizontal direction. The origin is at the top left corner of the shell window client area. In VGA (640 x 480 pixels) mode a screen has 9600 twips in the horizontal direction.

Logo Y pos= **Y twips**

Y twips is the number of twips (a Visual Basic unit) in the vertical direction. The origin is at the top left corner of the shell window client area. In VGA mode a screen has 7200 twips in the vertical direction.

Options for the settings of the icons in the SHELL window

The following properties can be set in the [IconGallery] chapter:

Frame1 is the frame that acts as a placeholder for all the icons. For this SHELL window object it is possible to set the following properties:

Frame1.Enabled=0/-1

0/-1 is a false (=0) or true (= -1) variable that sets the icon gallery to enabled or disabled. The default is false (disabled).

Frame1.Visible=0/-1

0/-1 is a false (=0) or true (= -1) variable that sets the icon gallery to visible or invisible. The default is false (invisible).

Frame1.Left= X twips

X twips is the number of twips (a Visual Basic unit) in the horizontal direction. The origin is at the top left corner of the shell window client area. In VGA mode a screen has 9600 twips in the horizontal direction.

Frame1.Top= Y twips

Y twips is the number of twips (a Visual Basic unit) in the vertical direction. The origin is at the top left corner of the shell window client area. In VGA mode a screen has 7200 twips in the vertical direction.

Icon x is icon number *x*. *X* must be a number between 0 and 6, so the maximum number of icons is seven. For each Icon *x* the following properties can be set:

Icon x File=icon picture file

icon picture file is the *.ico file that contains the icon that you want to show in the icon gallery.

Icon x Visible=0/-1

0/-1 is a false (=0) or true (= -1) variable that sets the icon to visible or invisible. The default is visible if the **Runs=** property has a value.

Icon x Runs=program {/DIR:....} {/MIN|/MAX}

program is the command line syntax of the executable program that you want to run, including arguments that the programs needs to run correctly. Additionally you can specify the following options:

/DIR:directory **directory** is the working directory where the program specified by **Icon x Runs=program...** will be started. The default value is the CurrentDir of the [frmShell] chapter.

/MIN To run the program minimized, that is as an icon. This works only for WINDOWS programs and not for DOS programs)

/MAX To run the program maximized, that is full-screen. This works only for WINDOWS programs and not for DOS programs)

Special meta commands exist to run a subroutine of the shell program. These start with a \$. A description of the meta commands is given in chapter 3.

If you select a menu item by clicking SHELL will attempt to run the program specified by Runs=. It is possible that the program cannot be run. SHELL will then give an error message as follows Sorry, cant run application In that case you have to change the "Runs" settings in the SHELL.INI file to a command line which will run the program successfully. Some programs will only allow once instance of the program to be running. In that case the same error message will appear, you will have to check yourself which problem causes this error message.

Icon x Caption=**name**

name is a string that will appear as the title under the icon. The string may contain a description for multiple languages (see chapter 4)

Options for the settings of the menus in the SHELL window

This chapter describes the possible settings of the properties in the [Menu x Items] chapter. In this case x is the number of the main menu that appears on the top of the SHELL client area. X must be a number between 0 and 19, so it is possible to create twenty main menu items. For each main menu item a separate [Menu x Items] chapter is needed to specify the sub menu items in it. The following properties can be set in a [Menu x Items] chapter

Menu x name=**name**

name is a string that will appear as the caption of the main menu. The string may contain a description for multiple languages (see chapter 4)

Menu x visible= 0/-1

0/-1 is a false (=0) or true (=1) variable that sets the main menu item to visible or invisible. The default is visible if the Name= property has a value.

Item y Name=**name**

name is a string that will appear as the caption of the sub menu. The string may contain a description for multiple languages (see chapter 4)

Item y Enabled=0/-1

0/-1 is a false (=0) or true (=1) variable that sets the sub menu item to enabled or disabled. When disabled the sub menu item may not be selected by the user, but it can still appear grayed in the menu when the visible property is set to true. The default is enabled if the Runs= property has a value.

Item y Visible=0/-1

0/-1 is a false (=0) or true (=1) variable that sets the sub menu item to visible or invisible. The default is false (invisible) if the Runs= property has a value.

Item y Runs = program {/DIR:....} {/MIN|/MAX}

program is the command line syntax of the executable program that you want to run, including arguments that the programs needs to run correctly. Additionally you can specify the following options:

/DIR:directory **directory** is the working directory where the program specified by Icon x Runs=**program...** will be started. The default value is the CurrentDir of the [frmShell] chapter.

/MIN To run the program minimized, that is as an icon. This works only for WINDOWS programs and not for DOS programs)

/MAX To run the program maximized, that is full-screen. This works only for WINDOWS programs and not for DOS programs)

Special meta commands exist to run a subroutine of the SHELL program. These start with a \$. A description of the meta commands is given in chapter 3.

If you select a menu item by clicking SHELL will attempt to run the program specified by Runs=. It is possible that the program cannot be run. SHELL will then give an error message as follows Sorry, cant run application In that case you have to change the "Runs" settings in the SHELL.INI file to a command line which will run the program successfully. Some programs will only allow once instance of the program to be running. In that case the same error message will appear, you will have to check yourself which problem causes this error message.

3 Special options for the Runs = property

Not all the menu items are necessarily used for running executable programs. It is possible to specify in the SHELL.INI file meta commands instead of an executable file. The difference is that a meta command will run a subroutine which is part of the WL_SHELL.EXE executable program. The purpose to provide the user with a number of options for using or changing the SHELL program while it is running. The meta commands supported at this time are:

\$Edit A short description for the default editor that is specified in the SHELL.INI

\$SetLanguage Nr: Change the language to the Nr. The first language is number 0 and the second language is 1

\$ResetIni Reread all the settings in the SHELL.INI file. You can use this option to implement changes in the settings. This option is very useful while you are developing a custom SHELL. If you include \$ResetIni and Edit SHELL.INI options in your menu, you can edit the SHELL.INI file and then immediately see if the changes work.

\$AboutBox {Nr}: Shows a DELFT HYDRAULICS standard about box, similar to the about box used in all WINDOWS programs. Nr is the number of seconds it will be shown. Default is 60 seconds. The user can close the window before that by pressing [Enter] or clicking the OK button. It is customary to have an about box entry at the end of the sub menu belonging to the help menu.

\$Exit This will end the execution of the SHELL program. It is customary to have an entry like this at the end of the sub menu belonging to the first menu. Usually the first menu is the File menu. In that case the short cut key combination would be [Alt][F][X]. This works in many windows programs.

4 Language support in the shell program

In all properties that havename....= as the description of the setting it is possible to support multiple languages. This applies to the menu and the icon names that are specified in the SHELL.INI file. To support languages the following items must be included in SHELL.INI:

1. In thename....= property separate the description for each language by a comma character. If the description itself contains a comma then enclose the description with double quote characters ("description"). The first language could be English and the second language your language of choice. For example:

NameOfShell=Database Shell, Shell base de datos

This sets the English description to "Database Shell" and the Spanish description to "Shell base de datos". If you do not supply a second language description, the first description will be used as default.

2. In one of the main menus provide two sub menu options that will switch the language. To do that use the **Runs=\$SetLanguage [nr]** meta command. For example:

Item 6 Name=Cambio lenguaje al Español, Cambio lenguaje al Español

Item 6 Runs=\$SetLanguage 1

Item 7 Name=Set Language to English, Set Language to English

Item 7 Runs=\$SetLanguage 0

The SHELL program itself uses the SHELL.LNG file to switch languages for its messages. This file contains the descriptions in two languages of all the messages of the SHELL program. SHELL uses a unique number to identify each message. You cannot change these numbers, since the program won't be able to locate the message when you do that. The SHELL.LNG file should be located in the same directory as the SHELL program. Some example lines of SHELL.LNG file are given below:

0,No translation available,Traducción no es disponible

1,English,Español

2,Shell program,Programa Shell

In the setup of the Delft decision support system a default SHELL.LNG file is located in the same directory as the WL_SHELL.EXE program. You can edit this file to change the language for one or messages.

Bijlage A.4 Case Management Tool

Inhoud

1	Introductie	1 - 1
1.1	Doelstelling	1 - 1
1.2	Functionaliteit	1 - 1
1.3	Opzet van de handleiding	1 - 2
2	Installatieprocedure	2 - 1
2.1	Installatieprocedure voor MS-Windows	2 - 1
3	Getting started	3 - 1
3.1	Getting started voor MS-Windows	3 - 1
4	Systeembeschrijving	4 - 1
4.1	Gehanteerde definities	4 - 1
4.2	Opzet	4 - 2
4.2.1	Taken	4 - 2
4.2.2	Relaties tussen de taken	4 - 3
4.2.3	Groepering van de modulen in taken	4 - 4
4.2.4	Beschrijving van taken - CASEDRAW.CMT	4 - 4
4.2.5	Invoer en uitvoer bestanden van de taken	4 - 6
4.2.6	Bestandstypen	4 - 10
4.2.7	Bestandsnamen in DESCROT.CMT	4 - 11
4.2.8	Bestandskenmerken (bytes,tijd)	4 - 12
4.2.9	Welke bestanden opnemen in DESCROT.CMT	4 - 13
4.2.10	Directories	4 - 14
4.2.11	CMT bestandsgroepen	4 - 16
4.3	Beschrijving van CMT bestanden	4 - 17
4.3.1	Case overzicht (CASELIST.CMT)	4 - 17
4.3.2	Register (REGISTER.CMT)	4 - 17
4.3.3	CMT tweetalig (CAPTIONS.LNG en ERRORS.LNG)	4 - 18
4.3.4	Return code (bestand met extensie .RTN)	4 - 18
4.3.5	CMT initiële bestand (CMT.INI)	4 - 20
4.3.6	CMT logging (bestand LOGGING.CMT)	4 - 21

4.4	Gebruikers modulen en bestandsnamen	4 — 22
4.4.1	Lezen van de bestandsnamen vanuit CASEDESC.CMT	4 — 22
4.4.2	Lezen van de bestandsnamen vanuit command line.	4 — 23
4.4.3	Lezen van de bestandsnamen mbv Vervang utility	4 — 23
4.4.4	Combinatie van de voorgaande methoden.	4 — 25
4.5	Selectie uit een lijst	4 — 26
4.6	Het werken met een case	4 — 28
4.6.1	Laden van een case (Import)	4 — 28
4.6.2	Starten van een taak	4 — 29
4.6.3	Beëindigen van een taak	4 — 30
4.6.4	Opslaan van een case onder andere naam (Save As)	4 — 31
4.6.5	Opslaan van een case (Save)	4 — 32
4.6.6	Verlaten van een case (Leave)	4 — 32
4.6.7	Wissen van een case (Delete)	4 — 32
4.6.8	Batch mode (Define Batch)	4 — 33
4.7	Dynamic Data Exchange (DDE) in het CMT voor MS-Windows	4 — 34
4.7.1	Syntax van een DDE opdracht	4 — 34
4.7.2	Afhandeling van de DDE communicatie	4 — 35
4.7.3	Voorbeeld van een DDE toepassing	4 — 35
5	Initialisatie van het case beheer	5 — 1
6	Beperkingen	6 — 1
7	Utilities	7 — 1
7.1	Functies voor het opvragen van geregistreerde case informatie	7 — 1
7.1.1	GETSCN functie (Get Case)	7 — 1
7.1.2	GETTSK functie (Get Task)	7 — 3
7.1.3	GETFLN functie (Get Filename)	7 — 5
7.2	CMDESIGN utility	7 — 7
7.3	CMUPDATE utility	7 — 7

1 Introductie

De gebruikersdocumentatie beschrijft het software pakket Case Management Tool, CMT in het kort. De tool is beschikbaar op de UNIX en op de MS-Windows platforms. MS-Windows versie beschikt over enkele extensies t.o.v. de UNIX versie.

1.1 Doelstelling

Het bouwen van de integrale systemen ter ondersteuning van de beslissingen speelt steeds meer een belangrijker rol. Een basiseenheid van analyse, dat met het integrale systeem uitgevoerd wordt, is een case.

Een case is een unieke combinatie van informatie (in- en uitvoerbestanden). Een nieuwe case kan ontstaan door een keuze te maken uit een lijst van mogelijkheden, zoals het kiezen van een hydrologisch jaar, of door bepaalde invoer data te wijzigen. Hoe meer modules bij een analyse zijn betrokken hoe meer cases er in het algemeen kunnen ontstaan. Vaak bevat een case alleen een paar bestanden, die verschillend zijn ten opzichte van andere cases. In zo'n geval is het niet nodig om per case alle bestanden te bewaren. Een verwijzing naar de plaats, waar zich deze gemeenschappelijke bestanden bevinden, is voldoende. Bij het wissen van een case moeten we dan altijd nagaan, of de bestanden niet in andere cases gebruikt worden, en alleen die bestanden verwijderen, die voor de te wissen case uniek zijn.

Bij het uitvoeren van een analyse zijn vaak verschillende modules nodig, die van elkaar afhankelijk zijn en daarom in de juiste volgorde gedraaid moeten worden. Wanneer één module in de modules-structuur opnieuw wordt gedraaid voor een bepaald case, dan zijn de uitkomsten van de modules, die daarvan afhankelijk zijn, ongeldig. Om de geactualiseerde uitkomsten te verkrijgen, moeten ook de afhankelijke modules gedraaid worden.

Alle bovengenoemde informatie met betrekking tot cases moet geadmineistreerd worden. In de complexe systemen is dat een probleem.

Om de ontwerper van het integrale systeem, en uiteindelijk ook de eindgebruiker, te ondersteunen met het casebeheer, is bij WL het Case Management Tool ontwikkeld. Dit stelt de ontwerper in staat de bestanden efficiënt te organiseren en consistentie van de cases te bewaken.

1.2 Functionaliteit

Het CMT is toepassingsonafhankelijk. Dat betekent, dat het CMT de case beheer taken kan uitvoeren onafhankelijk van het feit, welke en hoeveel data in het instrumentarium gebruikt worden en uit welke en hoeveel modules het instrumentarium bestaat. De specifieke instrumentariumkenmerken dienen opgegeven worden in de CMT-sturingsfiles, op wiens basis het CMT het case beheer uitvoert. De CMT kan vergeleken worden met een soort kapstok, waaraan de ontwerper van het instrumentarium eigen modules hangt.

De CMT kent twee soorten gebruikers: de ontwerper van het instrumentarium en de eindgebruiker. De ontwerper integreert eigen instrumentariumonderdelen met de CMT om van de CMT functies gebruik te kunnen maken. De eindgebruiker krijgt dan slechts te maken met één systeem, waarin geen grens tussen de CMT en de modules zichtbaar is. De eindgebruiker voert de analyse met het systeem onder bewaking van de integriteit door de CMT.

De CMT neemt de volgende functies voor zijn rekening:

- administreren van de cases (bijhouden welke gegevens bij welke case horen),
- waarborgen van de logische volgorde van de uitvoering van de acties
- het tonen van de user interface, waarmee de gebruiker:
 - met een case kan manipuleren (inlezen, opslaan, wissen, etc.),
 - taken (modules) kan kiezen en opstarten,
 - status van een taak kan zien,
 - onderlinge relaties tussen de taken kan zien,
 - logging (van de CMT en van afzonderlijke taken) kan bekijken en printen,

1.3 Opzet van de handleiding

Deze CMT handleiding is voor zowel MS-Windows platform als voor UNIX platform bedoeld. De hoofdstukken twee en drie bevatten een aparte beschrijving van de installatie en 'getting started' voor beide platforms. Hoofdstuk vier bevat de beschrijving van het CMT systeem, inclusief de enige extensie van MS-Windows versie - de DDE communicatie.

De voorbeelden in deze handleiding refereren aan MS-Windows platform. De voorbeelden zijn ook voor UNIX platform geldig, mits de backslash (\) door een slash (/) vervangen wordt. I.v.m. de overdraagbaarheid tussen de platforms houdt het CMT zich aan de MS-Windows/DOS conventies t.a.v. de bestandsnamen.

2 Installatieprocedure

2.1 Installatieprocedure voor MS-Windows

Om het CMT te installeren, plaats de diskette genaamd Case Management Tool in de diskette drive, ga naar deze diskette drive en tik in:

```
INSTALL <drive:> <ENTER>
```

<drive:> is de schijf, waarop de CMT software geïnstalleerd moet worden, bijvoorbeeld:

```
INSTALL C: <ENTER>
```

Op de schijf wordt de directories \CASEMAN aangemaakt, met daarin de onderstaande bestanden:

caseman.exe	-	CMT executable,
xwmba400.dll	-	XVT Dynamic Link Library voor caseman.exe,
xwmte400.dll	-	XVT Dynamic Link Library voor caseman.exe,
vervang.exe	-	CMT utility program,
vervang.err	-	error codes, teruggegeven door vervang.exe,
cmtfunc.lib	-	utility functies voor DOS,
cmtfunc.dll	-	utility functies voor MS-Windows,
cmtfunc.err	-	errors codes, teruggegeven door utility functies,
bugs.txt	-	lijst met de bekende bugs in het CMT.

Om de demo applicatie te installeren, plaats de diskette genaamd "CMT - Demo" in de diskette drive, ga naar deze diskette drive en tik in:

```
INSTALL <drive:>
```

<drive:> is de schijf, waarop de CMT demo geïnstalleerd moet worden. Op de opgegeven schijf worden de directory \CMTDEMO aangemaakt, met daarin de volgende subdirectories:

..\MYAPPL	-	sturingsfiles van de demo-applicatie en case directories,
..\DDEAPPL	-	sturingsfiles van de DDE demo-applicatie en een case directory,
..\DATA	-	algemene data gebruikt in demo applicatie,
..\PROGRAMS	-	executables and batch-files, gebruikt in de demo applicatie.

3 Getting started

Voor de korte inleiding in het gebruik van het CMT maken we gebruik van een demo van het integrale instrumentarium, genaamd \CMTDEMO\MYAPPL. De demo werkt met een eenvoudige fictieve gebiedsschematisatie en geeft antwoorden op de vragen over watervraag, sediment transport en waterkwaliteit in het gebied.

3.1 Getting started voor MS-Windows

Het CMT voor MS-Windows starten we op door de Run... menuoptie van File menu te kiezen en daarna in te tikken :

```
\CASEMAN\CASEMAN.EXE \CMTDEMO\MYAPPL
```

Op het beeldscherm verschijnt het CMT window, zoals op de volgende pagina afgebeeld. In het CMT window is de instrumentariumstructuur zichtbaar, weergegeven door het blokschema. Elk blok stelt een taak (een actie) voor. De onderlinge relaties tussen de taken worden d.m.v. de pijlen aangegeven. Bovenaan het CMT window bevindt zich een listbox met het overzicht van alle aanwezige cases.

Direct na het opstarten van het CMT zijn alle taken grijs - er is nog geen case ingelezen.

De case-informatie kunnen we inlezen door een case uit de list box te selecteren, of door dubbel klikken op één van de taken, of door menu optie Case -> Import te kiezen.

Nadat de case ingelezen is, krijgen alle taken een kleur, welke de status van de taken in desbetreffende case aangeeft:

groen =	taak is reeds uitgevoerd,
paars =	taak is in uitvoering,
geel =	taak moet nog uitgevoerd worden,
rood =	het uitvoeren van een taak is niet mogelijk.

Door dubbel op het blokje te klikken kan de taak uitgevoerd worden.

Door een enkel klik op een taak kunnen we deze selecteren. De geselecteerde taak wordt door een kader gemarkeerd. Vervolgens kunnen we de taak logging van de geselecteerde taak inzien en afdrukken (menu optie *Task*). Dit is alleen mogelijk bij de taken, die reeds uitgevoerd zijn. De taak logging hoeft niet voor alle taken aanwezig te zijn, dat hangt van de applicatie af.

Het CMT maakt ook een algemene logging aan, dat we met een optie *Session* kunnen bekijken, afdrukken en wissen. In deze logging vinden we de informatie zoals de datum en tijd van in- en uitloggen, met welke cases we gewerkt hebben en welke taken er waren opgestart en wanneer.

Door de menu optie *Language* te kiezen kunnen we van taal veranderen.

Tijdens het werken met de case kunnen we diverse informatie en opmerkingen noteren (menu optie *Case->Edit Description*), welke als case beschrijving bij het opslaan van een case bewaard worden.

In het CMT kunnen we ook een batch definiëren. Onder een batch verstaan we een serie van de taken, die zonder tussenkomst van de gebruiker uitgevoerd worden. Eerst geven we aan welke taken in de batch moeten komen. Dat doen we door de menuoptie *Case->Define Batch* te kiezen en vervolgens door een enkel klik op de taak kennen we aangeven, welke taken we in de batch willen opnemen. Daarna starten we de batch met de optie *Case->Run Batch*. De batch kan tussentijds gestopt worden door het kiezen van de menu optie *Case->End Batch*.

Als we een andere case uit een listbox kiezen, terwijl een case reeds geladen is, wordt de nieuw geselecteerde case direct ingelezen. Indien de reeds geladen case is gewijzigd, vraagt het CMT, of de wijzigingen verloren moeten gaan.

Door het kiezen van de submenu van de menuoptie *Case* kunnen we de al dan niet gewijzigde case opslaan (*Save*), opslaan onder andere naam (*Save As*), verlaten zonder iets over de case te bewaren (*Leave*) of wissen (*Delete*).

Met *Leave* en *Delete* komen we in de situatie terecht, wanneer geen case geladen is (alle taken zijn grijs).

Met de optie *Case->Exit* verlaten we het CMT.

4 Systeembeschrijving

Het CMT is een pakket voor de ontwerper van het integrale instrumentarium. Dat wil zeggen, voor iemand die zelf het instrumentarium opzetten kan, door het systeem te analyseren en optimaal in te richten.

Kort samengevat, zal het opzetten van het integrale instrumentarium en vervolgens de integratie met het CMT er als volgt uitzien:

- alle in het instrumentarium te gebruiken modules op een rij zetten, met hun invoer en uitvoer,
- alle informatie-stromen in het instrumentarium analyseren en zich ervan vergewissen, dat de informatie goed van een module naar een ander doorgegeven wordt,
- de functionele eenheden (taken) van de modules samenstellen en per functionele eenheid de invoer en uitvoeren vaststellen,
- informatie, die voortvloeit uit de bovenstaande analyse, in de CMT sturingsbestanden opgeven.

De CMT documentatie richt zich tot de laatste twee punten.

4.1 Gehanteerde definities

In dit hoofdstuk worden de gehanteerde termen uitgelegd, hun plaats en de betekenis binnen het CMT.

Module

Een module is elke uitvoerbare eenheid. Voor MS-Windows en DOS is dat bijvoorbeeld de .exe, .com of .bat file.

Taak

Een taak is de functionele eenheid in het instrumentarium. Per taak administreert het CMT invoer en uitvoer. De taak kan van binnen uit verscheidene modules bestaan, maar deze zijn niet bij het CMT bekend. Alleen met een taak als geheel wordt in het CMT gehandeld.

Applicatie

Een applicatie is een bepaalde combinatie van de taken, met de bijbehorende invoer en uitvoer per taak. Deze informatie is in de sturingsbestanden opgeslagen, die zich in de zogenaamde applicatie directory bevinden. Voor de applicatie wordt de administratie van de cases door het CMT uitgeoefend.

Applicatie directory

Deze directory identificeert eenduidig de applicatie. In de applicatie directory bevinden zich de sturingsbestanden met alle informatie, die het CMT nodig heeft om met de applicatie te kunnen werken.

Case

Een case is in de breedste zin een verzameling van de gegevens, die een bepaald probleem beschrijven. In het CMT is een case een verzameling van de lokaties, waar zich de gegevens van een bepaald case bevinden.

Lokatie-naam

Een lokatie-naam identificeert unieke gegevens. Lokatie-naam kan verwijzen naar een bestand, naar een deel van een bestand of naar een tabel (of deel daarvan) in de database. Op zijn beurt kan een bestand weer een verwijzing (lokatie naam) naar een ander bestand bevatten.

4.2 Opzet

Het casebeheer in het CMT is gebaseerd op het feit, dat een case een verzameling van gegevens is, die zich op willekeurige lokaties kunnen bevinden. Het CMT administreert alleen de namen van deze lokaties.

In het huidige CMT verwijst een lokatie-naam naar een bestand. Omdat het case beheersysteem met een lokatiennaam als met de unieke identificatie omgaat, is het ook denkbaar dat het CMT naar een lokatie in de database verwijst.

Bij het veranderen van de case gegevens (of een deel van) ontstaat een nieuwe exemplaar van de gegevens. Het CMT vervangt dan de relevante oude lokatiennaam door de nieuwe. Een nieuwe case kan ook ontstaan door de combinatie van gegevens uit andere cases. In dit geval ontstaat alleen een nieuwe combinatie van lokatiennamen, er worden geen gegevens gedupliceerd.

Om de case beheertaken te kunnen uitvoeren, moeten we het instrumentarium beschrijven in de termen van taken en de invoer en uitvoergegevens per taak.

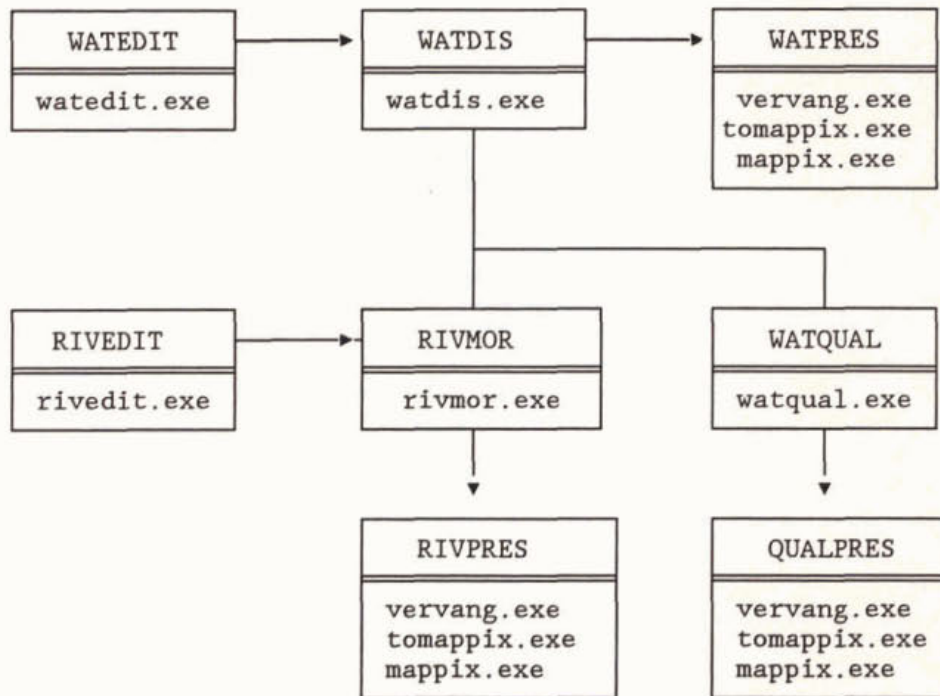
4.2.1 Taken

De taken zijn voor het CMT de afgesloten functionele eenheden. Bij het CMT is de invoer en uitvoer (lokatie daarvan) voor elke taak bekend en tevens de manier, waarop de taak vanuit het CMT opgestart moet worden. Het CMT heeft echter geen kennis over het inhoud van de taak, alsmede over de gegevens, die binnen de taak tussen de modules uitgewisseld worden.

Een taak kan de volgende acties representeren:

- aanpassen van data,
- uitvoeren van een berekening,
- selecties uit een lijst,
- kiezen van een optie
- keuze ja of nee, enzovoorts.

Onderstaande afbeelding geeft een voorbeeld van een applicatie met acht taken. Aan elk taak is een symbolische naam toegekend (WATEDIT,..):



4.2.2 Relaties tussen de taken

De taken zijn op bepaalde manier van elkaar afhankelijk. Bijvoorbeeld, eerst moeten de stappen mbt het waterbeweging doorgelopen worden (WATEDIT, WATDIS) en de sedimentatieparameters bepaald worden (RIVEDIT), en pas daarna kan de hoeveelheid sediment bepaald worden (RIVMOR).

De taak is afhankelijk van een andere, als deze de informatie van de andere taak nodig heeft. Deze relaties, in de bovenstaande afbeelding door pijlen aangegeven zijn, moeten aan het CMT bekend gemaakt worden. Het CMT leidt dan per taak af, wat z'n benedenstroomse en bovenstroomse taken zijn. Deze informatie wordt door het CMT gebruikt om de correcte volgorde in de taakuitvoering te waarborgen.

Als een taak uitgevoerd is (met groen aangegeven), betekend dat, dat z'n uitvoergegevens veranderd zijn. Een hiervan afhankelijke taak moet dan ook opnieuw uitgevoerd worden (met geel aangegeven), om van de gewijzigde gegevens gebruik te maken. Een hiervan afhankelijke taak kan niet uitgevoerd worden (met rood aangegeven), omdat z'n informatie nog niet beschikbaar is.

Als een taak nog steeds in uitvoering is (met paars aangegeven), moeten z'n benedenstroomse en bovenstroomse taken wachten.

Een applicatie, waar de taken niet van elkaar afhankelijk zijn is ook denkbaar.

4.2.3 Groepering van de modulen in taken

Een taak kan één of meer modules bevatten. De groepering van de modulen kan beïnvloed worden door de volgende afwegingen:

- mate van detail
Nadat een taak uitgevoerd is, constateert het CMT, dat de uitvoergegevens van de taak veranderd zijn. Het maakt daarbij niet uit, of alle of slechts een deel van de uitvoergegevens is veranderd. Als we het onderscheid toch wensen te maken, moeten we de taak in verscheidene taken splitsen.
- gebruik van één gegevens set in verscheidene cases.

4.2.4 Beschrijving van taken - CASEDRAW.CMT

De informatie over de taken, hun relaties en tevens de plaats van de taken op het scherm brengen we in het bestand CASEDRAW.CMT. Dit bestand moet geplaatst worden in de applicatie directory.

```

8 'Case Management Tool - Demo' 'CMT - Demo applicatie'
; Per taak de opstart opdracht
WATEDIT '\cmtdemo\programs\watedit.exe casesdesc.cmt WATEDIT'
WATDIS '\cmtdemo\programs\watdis.exe casesdesc.cmt WATDIS'
WATPRES '\cmtdemo\programs\watpres.bat +notepad @demand.res'
RIVEDIT '\cmtdemo\programs\rivedit.exe casesdesc.cmt RIVEDIT'
RIVMOR '\cmtdemo\programs\rivmor.exe casesdesc.cmt RIVMOR'
WATQUAL '\cmtdemo\programs\watqual.exe casesdesc.cmt WATQUAL'
RIVPRES '\cmtdemo\programs\startmpx.bat RIVPRES rivpres'
QUALPRES '\cmtdemo\programs\startmpx.bat QUALPRES qualpres'
;
; Positie van de blokken op het scherm. Per regel:
; naam taak, tekst in het blokje, x,y links boven (tov 0,0 punt
; links boven in % van de worksheet window)
0 100 ;scherm definitie (voorlopig n.v.t.)
WATEDIT 'Change agriculture data' 'Landbouw invoer' 5 18 17 38
WATDIS 'Compute water distrib.' 'Waterverdeling' 30 18 50 38
WATPRES 'Present w.distr. results' 'Waterver. res.' 78 18 94 30
RIVEDIT 'Change river morph. data' 'Rivier m. invoer' 5 45 17 65
RIVMOR 'Compute river morph.' 'Rivier morfologie' 30 45 50 65
WATQUAL 'Compute water quality' 'Water qualiteit' 55 45 75 65
RIVPRES 'Present river morphology' 'Morfologie res.' 32 80 48 92
QUALPRES 'Present water quality' 'Waterqual. res.n' 57 80 73 92
;
; Weergave van de relaties tussen de blokken. Geef per regel op:
; naam taak, aantal afhankelijke taken 'n', en vervolgens n-maal:
; namen van de afhankelijke taken
WATEDIT 1 WATDIS
WATDIS 3 WATPRES RIVMOR WATQUAL
WATPRES 0
RIVEDIT 1 RIVMOR
RIVMOR 1 RIVPRES
WATQUAL 1 QUALPRES
RIVPRES 0
QUALPRES 0

```

```

; Specificeer per taak de uitgaande lijnen: voor elke lijn
; is er een record opgenomen met :
; - aantal lijnpunten (min.2 - beginpunt,eindpunt
;   maximaal "n" - begin,eind,plus aantal knikpunten)
; - x,y coördinaten van elk punt
;   (in % tov 0,0 windowhoek links boven)
WATEDIT
2 10 25      30 25
WATDIS
2 40 23      78 23
3 40 26      65 26      65 45
2 40 20      40 45
WATPRES
RIVEDIT
2 10 52      30 52
RIVMOR
2 40 50      40 80
WATQUAL
2 65 50      65 80
RIVPRES
QUALPRES

```

Het bestand bestaat uit het aantal data blokken, die altijd in dezelfde volgorde moeten voorkomen. Data blokken mogen door commentaar regels gescheiden worden, maar binnen het data blok zelf mogen geen commentaar regels staan. Commentaar regels moeten een teken ';' in de eerste kolom bevatten.

Alle gegevens uit het bestand worden met vrij formaat ingelezen.

Data blok 0 (eerste regel)

Eerste regel bevat het aantal taken in het bestand en daarna de titel van de applicatie in twee talen. De titel verschijnt in de titel-bar van het CMT window.

Data blok 1

Voor elke taak specificeert de ontwerper 1 regel met:

- de symbolische naam van de taak,
 - elk taak heeft een symbolische naam, dat in hoofdletters moet zijn en maximaal 8 letters lang. De volgorde van de taken moet in elk data blok hetzelfde zijn.
- de manier waarop deze taak opgestart zal worden,
 - De hele opstart opdracht kan uit één of meer deelopdrachten bestaan. De afzonderlijke deelopdrachten moeten met "+" gescheiden worden.

Het aantal deelopdrachten is beperkt alleen door de maximaal toegestane lengte van de regel in de CASEDRAW.CMT bestand (zie hoofdstuk Beperkingen). In één opstart opdracht kunnen ongelijksoortigedeelopdrachten gebruikt worden. Voor MS-Windows kan het zijn: Windows executable, een DOS programma en een DDE opdracht.

Belangrijk: voorafgaand aan de data blok 2 moet één regel gespecificeerd worden, genoemd scherm definitie. Gegevens vanuit deze regel worden nog niet gebruikt.

Data blok 2

In dit deel bepaalt de ontwerper de positie van de blokjes op het scherm en de tekst daarin. Voor elke taak specificeert de ontwerper 1 regel met:

- de symbolische naam van de taak,
- taak omschrijving voor twee talen (tussen '),
- x,y-coördinaat van het blokhoekje links boven,
- x,y-coördinaat van het blokhoekje rechts beneden,
coördinaten zijn in percentage t.o.v. de 0,0 hoek van de CMT window opgegeven.

Data blok 3

In dit deel specificeert de ontwerper de afhankelijkheid tussen de taken. Voor elke taak specificeert de ontwerper 1 regel met :

- de symbolische naam van de taak,
- aantal taken 'n', die van desbetreffende taak direct afhankelijk zijn,
- en tenslotte 'n' maal: symbolische naam van de afhankelijke taken

Data blok 4

In dit deel specificeert de ontwerper de lijnen, die tussen de blokjes op het scherm getrokken moeten worden. Voor elke taak specificeert de ontwerper 1 regel met de symbolische naam van de taak, gevolgd door 0, 1 of meer vervolgregels, afhankelijk van het aantal direct afhankelijke taken, zoals in de voorgaande data blok gespecificeerd is. Inhoud van de vervolg regel:

- aantal lijnpunten. Dit moet minimaal 2 zijn (alleen begin en eindpunt van de lijn) en maximaal n, waar n is beginpunt plus het aantal knikpunten plus eindpunt).
- n-maal: x,y coördinaten van de lijnpunten (in percentage t.o.v. de 0,0 hoek van de CMT window links boven)

4.2.5 Invoer en uitvoer bestanden van de taken

Het CMT registreert per taak afzonderlijk de invoer en uitvoer bestanden (de namen daarvan). De opsomming van alle bestanden, die door het CMT op deze manier geregistreerd zijn, vormt een case. De bestandsnamen zijn in het zogenaamd "case description" bestand gespecificeerd. Omgekeerd geldt, dat alleen die bestanden, die de ontwerper in de "case description" opgeeft, vallen onder het case beheer.

Elke case heeft een eigen "case description" bestand. Daarnaast bestaat een prototype van het "case description" bestand, die als basis dient voor het afleiden van de "case descriptions" per case.

Behalve de bestandsnamen per taak, staat in de "case description" bestand ook andere informatie, die uniek voor de case is: de status van elk taak, korte en lange case omschrijving.

4.2.5.1 Bestand DESCROT.CMT (description prototype)

In dit hoofdstuk wordt het "description prototype" bestand beschreven. Dit bestand maakt de ontwerper zelf bij het opzetten van het instrumentarium. Van dit prototype worden de "case descriptions" voor elk case afgeleid.

```
# short case description
# long case description
WATEDIT 0
I \CMTDEMO\DATA\*.MTO          "meteo data " "meteo data "
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT         "crop fact. " "crop fact. "
IO ..\BASECASE\WATDIS.DAT      "schemat.   " "schemat.   "
O ..\BASECASE\WATEDIT.LOG      "logging    " "logging    "      N
WATDIS 0
I \CMTDEMO\DATA\#.MTO         "meteo data " "meteo data "
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT         "crop fact. " "crop fact. "
I ..\BASECASE\WATDIS.DAT      "schemat.   " "schemat.   "
O ..\BASECASE\DEMAND.RES       "demand     " "demand     "
O ..\BASECASE\OUTFLOW.RES     "outflow    " "outflow    "
O ..\BASECASE\WATDIS.LOG      "logging    " "logging    "      N
WATPRES 0
I ..\BASECASE\DEMAND.RES       "demand     " "demand     "
I ..\BASECASE\OUTFLOW.RES     "outflow    " "outflow    "
RIVEDIT 0
IO ..\BASECASE\RIVMOR.DAT      "river schem" "river schem"
O ..\BASECASE\RIVMOR.LOG      "logging    " "logging    "      N
RIVMOR 0
I ..\BASECASE\OUTFLOW.RES     "outflow    " "outflow    "
I ..\BASECASE\RIVMOR.DAT      "river schem" "river schem"
O ..\BASECASE\RIVMOR.RES     "morph. res " "morph. res "
WATQUAL 0
I ..\FIXED\WATQUAL.DAT         "qual. schem" "qual. schem"
I ..\BASECASE\OUTFLOW.RES     "outflow    " "outflow    "
O ..\BASECASE\CONCENTR.RES    "concentrat." "concentrat."
RIVPRES 0
I ..\BASECASE\RIVMOR.RES     "morph. res " "morph. res "
QUALPRES 0
I ..\BASECASE\CONCENTR.RES    "qual. res  " "qual. res  "
```

Eerste regel

Deze regel wordt voor de korte case omschrijving gereserveerd. In de eerste kolom moet een teken '#' staan.

Tweede regel

Deze regel wordt voor de lange case beschrijving gereserveerd. In de eerste kolom moet een teken '#' staan.

Data blokken per taak

Na de regels met omschrijving volgt per taak een data blok. De volgorde van de data blokken per taak moet hetzelfde zijn als de volgorde van de taken in de CASEDRAW.CMT bestand. Data blokken mogen door commentaar regels gescheiden worden, maar in het data blok zelf mogen geen commentaar regels staan. Alle gegevens worden met vrij formaat ingelezen en moeten door spaties gescheiden worden.

Inhoud van het data blok per taak:

Regel 1:

- naam van de taak,
- status van de taak (in het prototype geen betekenis).

Regel 2:

- bestandstype (I, IO, O, D),
- bestandsnaam
.. \ staat voor de applicaties directory en wordt na het opstarten van het CMT door de applicatie directory, dat op de command line opgegeven is, vervangen. Dit staat ons toe de applicatie makkelijk te hernoemen.
Met de indicatie BASECASE geven we aan, dat dit bestand per case kan variëren.
- bestandsomschrijving voor twee talen
de omschrijving voor één of beide talen mag weggelaten worden. Als deze beide aanwezig zijn, moeten ze met een dubbele quote worden afgesloten, met minimaal 1 character ertussen (" " mag, "" mag niet). De bestandsomschrijving wordt niet door het CMT zelf gebruikt, maar door de aan het CMT gekoppelde utilities (zie utilities documentatie).
- indicator
bestaat uit 1 letter en wordt niet door het CMT gebruikt, maar door de utilities (zie utilities beschrijving).

Regel 2 kan meermalen herhaald worden, afhankelijk van het feit hoeveel bestanden we per taak wensen op te nemen.

4.2.5.2 Bestand CASEDESC.CMT (case description)

Case description bestand is voor elk case aanwezig in de case directory. Dit bestand wordt van de DESCROT.CMT afgeleid, onder toevoeging van de voor de case specifieke bestandsnamen, case omschrijvingen, taak statussen en bestandskenmerken.

```
#Tweede calibratie 1992
#Deze case is van de Calibratie 1992 afgeleid.
#De waterbeweging is opnieuw doorgerekend.
WATEDIT 1
I \CMTDEMO\DATA\*.MTO
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT 180 '-1350986664'
IO ..\1\WATDIS.DAT 205 '-1303386318'
O ..\1\WATEDIT.LOG 290 '-1303386318'
WATDIS 1
I \CMTDEMO\DATA\YEAR92.MTO 154 '-1342002288'
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT 180 '-1350986664'
I ..\1\WATDIS.DAT 205 '-1303386318'
O ..\2\DEMAND.RES 273 '-1303301090'
O ..\2\OUTFLOW.RES 273 '-1303301090'
O ..\2\WATDIS.LOG 479 '-1303301090'

WATPRES 2
I ..\2\DEMAND.RES 273 '-1303301090'
I ..\2\OUTFLOW.RES 273 '-1303301090'
RIVEDIT 2
IO ..\10\RIVMOR.DAT 164 '-1303800832'
O ..\#\RIVMOR.LOG
RIVMOR 4
I ..\2\OUTFLOW.RES 273 '-1303301090'
I ..\10\RIVMOR.DAT 164 '-1303800832'
O ..\#\RIVMOR.RES
WATQUAL 2
I ..\FIXED\WATQUAL.DAT 90 '-1350991852'
I ..\2\OUTFLOW.RES 273 '-1303301090'
O ..\#\CONCENTR.RES
RIVPRES 4
I ..\#\RIVMOR.RES
QUALPRES 4
I ..\#\CONCENTR.RES
```


Eerste regel

Deze regel bevat de korte case omschrijving. In de eerste kolom bevindt zich het teken '#', gevolgd door een korte case omschrijving. De korte case omschrijving wordt door de gebruiker bij het opslaan van een case opgegeven.

Tweede regel

In de eerste kolom bevindt zich het teken '#', gevolgd door een lange case omschrijving. Deze regel kan een aantal maal herhaald worden, afhankelijk van het feit hoe lang de omschrijving is.

De Lange omschrijving dient voor het bewaren van de opmerkingen van de gebruiker. Deze kan de tekst invoeren tijdens het werken met een case.

Data blok per taak

Regel 1:

- naam van de taak,
- status van de taak. Deze kan één van de drie waarden hebben:
 - 1 = taak is reeds uitgevoerd,
 - 2 = taak moet nog uitgevoerd worden,
 - 4 = het uitvoeren van een taak is niet mogelijk.

Regel 2:

- bestandstype (I,IO,O,D),
- bestandsnaam,
case description bevat de actuele bestandsnamen, die door het CMT toegevoegd zijn. Het teken # i.p.v. de subdirectory betekent, dat het betreffende bestand niet gebruikt wordt.
- grootte van het bestand in bytes,
- tijd van het creëren van het bestand.

4.2.6 Bestandstypen

Het CMT onderscheidt vier bestandstypen. Deze moeten in hoofdletters gespecificeerd worden:

- I = invoer bestand,
- IO = invoer/uitvoer bestand,
- O = uitvoer bestand,
- D = bestand om te wissen.

Invoer bestand (I)

Voor een invoer bestand geldt, dat deze tijdens de taakuitvoering niet verandert, het wordt binnen de taak alleen gelezen. Bij het starten van een taak moet het invoer bestand aanwezig zijn, anders kan de taak niet uitgevoerd worden.

Als invoerbestand kan bijvoorbeeld het bestand met crop factoren gemarkeerd zijn (Crop.fil.dat in het voorbeeld), of het bestand, dat door een andere taak aangemaakt is (Demand.res in taak WATPRES is een uitvoerbestand van WATDIS).

Invoer/uitvoer bestand (IO)

Het CMT beschouwt dit bestand als een bestand, dat tijdens de taakuitvoering gelezen en daarna overschreven wordt (Watdis.dat in taak WATEDIT). Het maakt daarbij niet uit, of het bestand door één en hetzelfde module gelezen en geschreven wordt, of door één module gelezen en door een andere geschreven. Bij het starten van een taak moet het bestand van dit type aanwezig zijn, anders kan de taak niet uitgevoerd worden. Bij het starten van desbetreffende taak maakt het CMT een kopie van dit bestand, omdat het oorspronkelijke bestand niet overschreven mag worden. Deze kan immers ook door een andere case gebruikt worden.

Vaak zijn dat diverse programma's voor het invoeren van gegevens, die werken met IO-bestanden.

Uitvoer bestand (O)

Uitvoer bestand wordt binnen de taak nieuw aangemaakt. Wat een uitvoerbestand van de ene taak is, kan het invoerbestand van de andere taak zijn.

Bestand om te wissen (D)

Bij het opstarten van een taak wordt het bestand, dat met een D gemerkt is, gewist. Dit is een bijzondere bestandstype, waarvan we alleen zelden gebruik zullen maken, bijvoorbeeld met D kan een hulpbestand aangegeven worden.

4.2.7 Bestandsnamen in DESCROT.CMT

In het prototype mogen willekeurige bestandsnamen staan. Daarbij moet men de volgende afspraken in acht nemen:

- een naam van het bestand met type IO en O moet er als volgt uit zien:
.. \BASECASE\ <naam >
Bij de taakuitvoering worden de nieuwe exemplaren van deze bestanden aangemaakt. Het CMT vervangt de string BASECASE door het bijbehorende casenummer en stuurt de IO/O bestanden naar de directory met dit nummer.

- als er binnen de taak uit het aantal bestanden geselecteerd wordt en de geselecteerde bestandsnaam naar de andere taak doorgegeven moet worden, specificeren we dat als volgt:
 - a) bij de taak, waarin geselecteerd wordt geven we het zoekpatroon op, bijvoorbeeld <dir>*.MTO, MTODATA.* , *.* , enz.
 - b) bij een taak, die de geselecteerde bestandsnaam moet ontvangen, geven we hetzelfde zoekpatroon op, maar nu met een teken # : <dir>\#.MTO, MTODATA.* , #.#, enz. (voor gedetailleerde beschrijving zie hoofdstuk Selectie uit een lijst)

4.2.8 Bestandskenmerken (bytes,tijd)

Het CMT registreert voor elk bestand, dat een onderdeel van een case maakt, het aantal bytes en de tijd van het aanmaak. Tijd wordt geregistreerd in aantal seconden sinds 1.1.1900 Universal Coordinated Time, volgens de systeem klok. D.m.v. het vergelijken van de geregistreerde en actuele kenmerken kan het CMT de eventuele veranderingen van het bestand, die buiten het CMT om plaats vonden, opmerken.

Controle op de bestandskenmerken is optioneel. In het initiële bestand CMT.INI kan de controle aangezet of uitgezet worden met de optie TimeCheck, en verder gestuurd worden met de optie InconsCaseReadOnly. Als de controle uitgezet is, blijft het CMT toch de bestandskenmerken registreren, alleen het vergelijken gebeurt niet.

Om te vermijden, dat de eindgebruiker zelf de opties TimeCheck en InconsCaseReadOnly uitschakelt, kunnen deze uit het CMT.INI bestand verwijderd worden.

De controle van bestandskenmerken komt aan de orde bij het opvragen van een case en bij het starten van een taak.

4.2.8.1 Bij het laden van een case

Bij het opvragen van een case worden de kenmerken uit Casedesc.cmt gelezen en met de actuele kenmerken vergeleken. Indien voor een file geen datum/bytes informatie in de casedesc.cmt beschikbaar is, dan worden de actuele kenmerken toegevoegd.

De gebruiker krijgt een lijst met bestanden gepresenteerd, waarvan de kenmerken niet kloppen (zie afbeelding op de volgende pagina).

Aan de hand van de bestandsnamen kan de gebruiker nagaan, wat er in het instrumentarium is misgegaan. Het kan gebeuren, dat een bestand bijvoorbeeld onbedoeld overschreven wordt.

De gebruiker kan kiezen of de case geactualiseerd moet worden (update the case) of niet (read only).

a) *wel actualiseren*

Actualiseren houdt in, dat het CMT opnieuw de status van de taken bepaalt. Een taak, waarin het bestand met inconsistente kenmerken voorkomt, krijgt een status 2 (= moet opnieuw uitgevoerd worden). Status van alle taken, die van de desbetreffende taak afhankelijk zijn, wordt op 4 (= kan niet uitgevoerd worden) gezet.

b) *niet actualiseren*

Niet actualiseren houdt in dat de oorspronkelijke status van alle taken zichtbaar wordt. De case kan echter inconsistente informatie bevatten. we kunnen bijvoorbeeld naar de resultaten kijken, die geproduceerd zijn op basis van het bestand, dat inmiddels is veranderd. De resultaten zijn daarom niet meer geldig. De gebruiker kan de inconsistente case niet opslaan, omdat opties Save en Save as.. niet actief zijn. Deze tweede optie moeten we alleen kiezen om even wat meer informatie over de case in te winnen. Dan moeten we de case weer verlaten om vervolgens de case opnieuw te laden, met de keuze 'update'.

Zoals gezegd, bij het laden van een inconsistente case worden Save menuopties default op niet-actief gezet. Dit kan veranderd worden met de optie InconsCaseReadOnly in het bestand CMT.INI. Indien we bij deze optie N opgeven, blijven de Save menuopties actief.

4.2.8.2 Bij het starten van een taak.

Bij het starten van een taak worden de kenmerken bij I en IO bestanden van desbetreffende taak gecontroleerd. Als de bestandskenmerken niet kloppen, krijgen we een lijst met bestanden gepresenteerd. Na het klikken van een OK button wordt de taak toch opgestart. Wij moeten wel nagaan, wat de oorzaak van de inconsistentie is. Bijvoorbeeld, een ander programma kan de bestanden van de lopende case onbedoeld overschrijven.

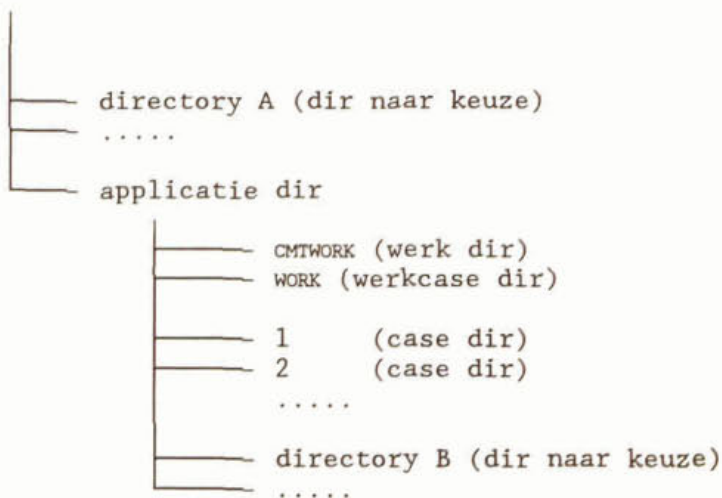
4.2.9 Welke bestanden opnemen in DESCROT.CMT

Alle bestanden, die onder het case beheer moeten vallen, dienen we in de prototype op te nemen. Het gaat om de onderstaande gevallen:

- uitvoerbestanden (IO,O), die we voor elk case willen bewaren. Deze markeren we met BASECASE.
- uitvoerbestanden (IO,O), die in een taak aangemaakt zijn en in een andere taak gebruikt worden. Omdat het CMT zorgt voor het doorgeven van de bestandsnamen van de ene taak naar de andere, moeten de bestand bij de creërende taak genoemd worden (als IO of O) en ook bij de ontvangende taak (als I). Deze bestanden worden dan ook voor elke case bewaard.
- invoerbestanden (I), die weliswaar per case nooit veranderen, maar waarvan we willen, dat:
 - a) ze bij het kopiëren van een case naar een ander vergelijkbaar instrumentarium meegekopieerd worden,
 - b) hun kenmerken (aantal bytes, tijd) door het CMT gecontroleerd worden,
 - c) de bestanden bij het CMT, om welke redenen dan ook, bekend zijn.

4.2.10 Directories

Omdat het CMT met volledige bestand(lokatie)namen werkt, is het case beheer in het CMT niet aan een bepaalde directory structuur gebonden. Maar omdat de gebruiker van het CMT niet met de filenamen te maken heeft, moeten er regels zijn, volgens welke het CMT zo nodig een nieuwe case directory aanmaakt voor de aangemaakte uitvoerfiles (type IO,O) of voor tijdelijke gegevens. Behalve de door de gebruiker gedefinieerde directories, komen er in elk CMT - instrumentarium de volgende directories voor: applicatie directory, case directories, werkcase directory en werk directory.



Applicatie directory (*<applicatie>*)

Dit is een directory, waarin zich alle informatie over de applicatie bevindt, die het CMT nodig heeft. Het gaat om de volgende bestanden:

- initiële informatie (cmt.ini)
- beschrijving van de taken en in- en uitvoerbestanden per taak (casedraw.cmt, descprot.cmt),
- overzicht van de beschikbare cases (caselist.cmt),
- een bestand, waarin geregistreerd wordt, hoe vaak een bestand gebruikt wordt (register.cmt),
- tekst van de menus en labels, fout meldingen (captions.lng, errors.lng)
- logging informatie (logfile.cmt)

De ontwerper maakt deze directory zelf aan bij het opzetten van het instrumentarium, en plaatst daarin sommige van de genoemde bestanden (zie hoofdstuk Initialisatie van het case beheer). Behalve genoemde bestanden mag ook andere informatie in de applicatie directory staan.

Het CMT wordt opgestart met de naam van de applicatie directory als argument.

Case directory (*<applicatie dir>* *<case id>*)

Case directory ontstaat bij het opslaan van een case. Case directory wordt gecreëerd als de subdirectory van de applicatie directory, en de naam van deze subdirectory (tevens de case id) wordt door het CMT gegenereerd, bijvoorbeeld *<applicatie>* *5*.

In de case directory wordt altijd het zogenaamde case description bestand geplaatst - Casedesc.cmt, welke de namen van de in case gebruikte bestanden bevat. Verder bevinden zich hier de bestanden, die in desbetreffende case nieuw aangemaakt resp. gewijzigd zijn. Case description kan ook het enige bestand zijn, dat in de case directory staat, omdat alle bestandsnamen in Casedesc.cmt naar andere directories kunnen verwijzen. De ontwerper zelf mag geen informatie naar de case directories schrijven.

Werkcase directory (\`<applicatie>`\WORK)

Dit is een tijdelijke case directory, die bij het opvragen van een case aangemaakt wordt. Naar deze directory worden alle uitvoerbestanden van een case, waarmee gewerkt wordt, gestuurd. Bij het opslaan van een case wordt van de werkcase directory een case directory gemaakt (hernoemd naar `<applicatie>`\`<case id>`). Indien de case niet bewaard moet blijven, wordt de inhoud van de werkcase directory gewist.

De ontwerper mag zelf geen bestanden naar de werkcase directory laten schrijven. Daarvoor dient men gebruik maken van de echte werk directory (cmtwork). In uitzondering is het wel mogelijk, maar dan moet de ontwerper zelf zorgen, dat direct na het beëindigen van een taak de eigen bestanden gewist worden.

Bij het verlaten van het CMT worden alle bestanden, mits nog in `..\WORK` aanwezig, gewist.

Werk directory (\`<application>`\CMTWORK)

Dit is een courante werk directory van het CMT. Na het opstarten van het CMT gaat het programma naar deze werkdirectory en vanuit hier start het CMT de taken. Deze directory dient als een echte werk directory voor het stallen van de tijdelijke bestanden. De hele inhoud van dit directory wordt bij het opvragen van een andere case eerst gewist.

Bij het verlaten van het CMT worden alle bestanden, mits nog in `..\CMTWORK` aanwezig, gewist.

Overige directories naar keuze

Behalve de vier genoemde directories is de ontwerper van het instrumentarium volledig vrij om een eigen directory structuur te definiëren. Dat zal nodig zijn voor alle vaste data (vanuit CMT oogpunt) en voor de in het instrumentarium gebruikte modules.

4.2.11 CMT bestandsgroepen

Op basis van de lokatie, waar zich een bestand bevindt, maakt het CMT onderscheid tussen drie groepen bestanden. we praten hier over de bestanden, die in de case description prototype opgenomen zijn.

a) *public files*

dat zijn alle bestanden, die zich niet in de applicatie directory resp. in de subdirectories daarvan bevinden. Dit kunnen bijvoorbeeld de gezamenlijke bestanden zijn van verscheidene applicaties, zoals meteohydrologische gegevens. Vanuit het CMT oogpunt zijn dat vaste gegevens, die niet veranderen.

b) *private fixed files*

dat zijn alle bestanden, die zich in de applicatie directory zelf bevinden, of in zijn subdirectories, maar anders dan de case, casewerk en werk directories. Vanuit het CMT oogpunt zijn dat vaste gegevens, die niet veranderen, maar wel specifiek zijn voor de desbetreffende applicatie.

c) *private variable files*

dat zijn alle bestanden van type IO, O. Deze (kunnen) variëren van case tot case.

De informatie, tot welke groep een bestand behoort, gebruikt het CMT bij het uitvoeren van de volgende case beheer operaties: wissen en kopiëren naar de andere applicatie.

Bij het wissen van een case wordt een "private variable file" gewist, als deze in geen case meer voorkomt. Dit in tegenstelling tot de "private fixed files" en "public files", die blijven bestaan, ook als zij in geen case voorkomen.

Bij het kopiëren van een case naar de andere, vergelijkbare applicatie, kopieert het CMT alleen "private fixed" en "private variable" bestanden.

4.3 Beschrijving van CMT bestanden

In dit hoofdstuk worden de CMT bestanden behandeld, behalve de reeds beschreven bestanden Casedraw.cmt , Descprot.cmt en Casedesc.cmt.

4.3.1 Case overzicht (CASELIST.CMT)

In dit bestand wordt het overzicht van de cases bijgehouden. Het bestand wordt met vrij formaat ingelezen en bevat per case 1 regel met de onderstaande informatie:

- case identificatie nummer (case id),
- korte omschrijving van de case. Dit is hetzelfde beschrijving zoals op de eerste regel van de Casedesc.cmt bestand.

```
10 'Basecase'
 1 'Calibratie 1992'
 2 'Tweede calibratie 1992'
```

4.3.2 Register (REGISTER.CMT)

In de register houdt het CMT bij, hoe vaak een bestand in het case beheer systeem voorkomt. Dat geldt voor de bestanden, die bij het CMT bekend zijn, dus de bestanden die de ontwerper bij het opzetten van het instrumentarium in "description prototype " opgeeft.

```
13
3 ..\FIXED\CROPFIL.DAT
1 ..\10\WATDIS.DAT
3 ..\10\RIVMOR.DAT
3 ..\FIXED\WATQUAL.DAT
2 ..\1\WATDIS.DAT
2 ..\1\WATEDIT.LOG
2 \CMTDEMO\DATA\YEAR92.MTO
1 ..\1\DEMAND.RES
1 ..\1\OUTFLOW.RES
1 ..\1\WATDIS.LOG
1 ..\2\DEMAND.RES
1 ..\2\OUTFLOW.RES
1 ..\2\WATDIS.LOG
```

Eerste regel bevat totaal aantal bestanden (n) in de register, met vrij formaat ingelezen.

Volgende regel bevat het getal, dat aangeeft hoe vaak een bestand gebruikt wordt en een bestandsnaam. Deze regel moet n-maal in de register voorkomen. Gegevens worden met vrij formaat ingelezen.

4.3.3 CMT tweetalig (CAPTIONS.LNG en ERRORS.LNG)

In het CMT kan de gebruiker kiezen, in welke taal de CMT teksten gepresenteerd moeten worden. Het gaat hierbij om de teksten van menu's, labels en commentaar dat naar de applicatie-logging geschreven wordt. Deze teksten zijn in CAPTIONS.LNG opgenomen. In het bestand ERRORS.LNG bevinden zich de teksten van de waarschuwingen en foutmeldingen. Beide bestanden hebben hetzelfde formaat:

```
0,"No translation available.", "Geen vertaling beschikbaar"
9,"Selected case :", "Geselecteerde case:"
11,"Case", "Rekengeval"
....
```

Elk regel van het bestand heeft de volgende inhoud:

- nummer, gevolgd door komma
- tekst in de taal 0, afgesloten in dubbel quotes, gevolgd door komma
- tekst in de taal 1, afgesloten in dubbel quotes.

De gebruiker moet altijd twee talen opgeven. De nummers van de teksten mogen niet veranderd worden. Gegevens worden met vrij formaat ingelezen. Er is een maximum gesteld aan de lengte van één tekst string - zie hoofdstuk CMT beperkingen.

4.3.4 Return code (bestand met extensie .RTN)

Om het CMT goed laten functioneren, moet de CMT de informatie krijgen of de taak al dan niet succesvol beëindigd is. Daarom is het belangrijk, dat de taak een return code meldt. Aan de return code kunnen we aflezen, of het programma normaal of niet normaal beëindigd was. Niet normaal kan betekenen:

- fout in het programma,
- foutieve data,
- wij willen aangegeven, dat een bepaalde actie moet volgen.

Alle executables geven een return code terug naar de operating system, maar niet de DOS batchfiles, die nog veelvoudig in de instrumentaria gebruikt worden. Daarom is in het CMT gekozen voor een generieke oplossing: modules moeten de return code naar een bestand schrijven.

Voor het bestand met return code geldt:

- het bestand moet een extensie RTN hebben,
- de naam van het bestand moet hetzelfde zijn als de naam van de taak, waartoe het bestand toebehoort,
- het bestand moet naar CMTWORK directory geschreven worden,
- in het bestand moet op de eerste regel als eerste getal een return code vermeldt staan. Deze wordt met vrij formaat ingelezen.

Verder mag het bestand ook andere informatie bevatten, het CMT kijkt alleen naar het eerste getal op de eerste regel.

Voorbeeld van een RTN bestand:

0 = return code
andere tekst
andere tekst

De code heeft voor het CMT de volgende betekenis:

0 : OK, succesvol beëindigen van de module,
99 : NoChange, module heeft geen voor CMT relevante acties uitgevoerd
anders dan 0 en 99 : de module eindigt met een fout.

Default waarden van OK/NoChange kunnen door de gebruiker gewijzigd worden in het initiële bestand CMT.INI.

Afhandeling van de return code

Na het beëindigen van een taak gaat het CMT in de CMTWORK directory zoeken naar het bestand <taak naam>.RTN en uit dit bestand een return code lezen. Indien het CMT geen relevant bestand met return code vindt, neemt het CMT aan, dat de taak met een return code OK beëindigd is.

Na het beëindigen van een taak verandert het CMT de status van de taak aan de hand van de ingelezen return code:

- OK ingelezen: status van de taak wordt op 1 (groen) gezet,
- NoChange ingelezen: status van de taak blijft ongewijzigd,
- anders: status van de taak wordt op 2 (geel) gezet.

Return code NoChange

Return code NoChange zal vooral van toepassing zijn bij de modulen, die invoergegevens modificeren of keuzes maken. we kunnen mbv zo'n module gegevens wijzigen, maar achteraf willen we toch van de wijzigingen afzien. Als we geen mogelijkheid hebben om dit aan het CMT bekend te maken, kan dat vervelende gevolgen hebben. we zouden bijvoorbeeld een hele reeks afhankelijke taken moeten overdoen. Daarom is de code NoChange geïntroduceerd. Als het CMT de code NoChange gedetecteerd heeft, blijft de oorspronkelijke status van de taak in kwestie en de daarvan afhankelijke taken gehandhaafd.

Return code en verscheidene modulen per taak.

Indien een taak uit verscheidene modulen bestaat, volgt het CMT de onderstaande procedures:

a) modulen zijn in Casedraw.cmt opgegeven, gescheiden met + teken :

```
TAAK1 '\models\prog1.exe casedesc.cmt + \models\prog2.exe casedesc.cmt'
```

Beide modulen moeten return code naar hetzelfde bestand schrijven - ..\CMTWORK\TAAK1.RTN. Na het beëindigen van prog1.exe leest het CMT TAAK1.RTN. Als de return code een fout aangeeft, worden de daarop volgende module(n) niet opgestart en taak krijgt een status 2. Als de return code OK of NoChange is, wordt de volgende module opgestart en de procedure herhaalt zich.

b) modulen zijn in de batch file opgenomen :

```
TAAK1 '\models\batch1.bat'
```

Het CMT heeft geen weet over de inhoud en gang van zaken binnen een batch-file. De ontwerper moet daarom zorgen, dat na het beëindigen van een batch-file de resulterende return code naar een file ..\CMTWORK\TAAK1.RTN geschreven is. Verdere afhandeling zoals bij a).

Return code tips.

Het kan voorkomen, dat het programma door een fout afgebroken wordt, die door de programmeur van tevoren niet voorzien was, en waardoor het programma beëindigd wordt voordat het bestand met return code geschreven kan worden. De volgende aanpak kan dit probleem grotendeels verhelpen. Zet direct aan het begin van het programma de return code op een fout-nummer (anders dan code OK en NoChange) en schrijf het RTN bestand weg. Pas net voor het normale einde van het programma zet de return code op OK en schrijf RTN bestand opnieuw weg.

Het gebruik van een negatieve return code, bijvoorbeeld -1, als NoChange code is handiger dan de in demo-applicatie gebruikte NoChange code (=99). De default return codes kunnen in CMT.INI gewijzigd worden.

4.3.5 CMT initiële bestand (CMT.INI)

Dit bestand bevat het aantal initiële settings voor het CMT. Het bestand wordt met vrij formaat ingelezen, en werkt met sleutelwoorden ([CMT], DefaultLanguage, enz.), die voor het opzoeken van de waarden in het bestand dienen. Behalve de in de beschrijving opgenomen data mag het bestand ook andere informatie bevatten (met het bestand wordt omgegaan als met de MS-Window ini-bestanden).

```
[CMT]
DefaultLanguage=0
TimeCheck=Y
ReturnCodeOK = 0
ReturnCodeNoChange = 99
InconsCaseReadOnly = Y
```

```
[MainWindow]
Window=5 6 65 85
Image= \cmtdemo\myappl\cmt.bmp
```

DefaultLanguage kan 0 of 1 zijn. Daarmee kiezen we de taal, waarin alle teksten bij het opstarten van het CMT verschijnen. Tijdens het werken met het CMT kunnen we van taal wisselen. De laatst gekozen taal wordt weer naar de CMT.INI geschreven bij het verlaten van het CMT.

TimeCheck kan Y (ja) of N (nee) zijn. Daarmee geven we aan, of we de controle van de bestandskenmerken willen (zie hoofdstuk Bestandskenmerken).

ReturnCodeOK geeft aan, welke return code van de modulen het CMT als OK code beschouwd.

ReturnCodeNoChange geeft aan, welke return code van de modulen het CMT als NoChange code beschouwd. De codes gelden dan voor alle modulen, die in de applicatie gebruikt worden.

InconsCaseReadOnly kan Y (ja) of N (nee) zijn. Daarmee geven we aan, of de Save menuopties na het laden van een inconsistente case al dan niet actief moeten blijven (zie hoofdstuk Bestandskenmerken).

Window specificeert de afmetingen van de CMT window en de positie van de window op het beeldscherm. Hier geven we op : X,Y coördinaat van de hoek links boven en X,Y coördinaat van de hoek rechts beneden. De coördinaten zijn in percentage van het fysische scherm, t.o.v. het 0,0 punt links boven. Tijdens het werken met het CMT kunnen we de afmetingen van de window naar wens aanpassen. Bij het verlaten van het CMT worden de actuele afmetingen naar CMT.INI geschreven.

Image specificeert de naam met een afbeelding, die we op de achtergrond van de CMT window afgebeeld willen zien. Het CMT ondersteund BMP formaat voor MS-Windows en XPM en XBM formaat voor X-Window systeem.

4.3.6 CMT logging (bestand LOGGING.CMT)

Sommige stappen, die de gebruiker tijdens het werken met het CMT onderneemt, worden naar het Logging.cmt bestand geschreven. Bijvoorbeeld: welke case was geselecteerd, welke taak was opgestart/beëindigd en wanneer, enz. De boodschappen worden in de gekozen taal geschreven.

4.4 Gebruikers modulen en bestandsnamen

In de case description CASEDESC.CMT zijn alle bestandsnamen geregistreerd, die bij een case horen. Deze bestandsnamen moeten uiteindelijk door de gebruikersmodulen gelezen kunnen worden. Er is een viertal mogelijkheden, hoe een module de bestandsnamen voor een specifieke case kan betrekken:

- vanuit het CASEDESC.CMT bestand.
- vanuit de command line.
- vanuit een eigen bestand (mbv Vervang utility).
- combinatie van bovenstaande methoden.

4.4.1 Lezen van de bestandsnamen vanuit CASEDESC.CMT

Een module kan de bestandsnamen van een bepaalde case direct uit de case description CASEDESC.CMT lezen. In dit geval geven we in het bestand CASEDRAW.CMT deze command-line op: <module naam> CASEDESC.CMT [arg1]

Het CMT zorgt ervoor, dat op het moment dat de module opgestart wordt, er een actuele CASEDESC.CMT bestaat in de courante werkdirectory. (..\CMTWORK), waarin de taak opgestart wordt.

Voorbeeld:

Wij hebben een programma EDITPROG.EXE in een directory \PROG. Het programma heeft twee files nodig: \FIXED\BASIS.DAT en WERK.DAT. Het eerste bestand is een bestand dat nooit verandert. Het tweede bestand kan per case variëren.

In CASEDRAW.CMT specificeren wij:

```
EDITPROG '\PROG\EDITPROG.EXE CASEDESC.CMT'
```

In DESCROT.CMT geven we op:

```
.....
EDITPROG
I  \FIXED\BASIS.DAT
I  ..\BASECASE\WERK.DAT
```

Van het bovenstaande prototype leidt het CMT de actuele versie van CASEDESC.CMT af, die zich bij het opstarten van de module in de courante werk directory ..\CMTWORK bevindt. De EDITPROG.EXE moet zodanig geprogrammeerd worden, dat deze eerst het sleutelwoord EDITPROG zoekt en daarna de bestandsnamen inleest. Het beste is het sleutelwoord ook op de command line of elders op te geven.

4.4.2 Lezen van de bestandsnamen vanuit command line.

In dit geval moeten de per case variërende bestanden met een teken "@" aangegeven worden. Het CMT zoekt het met "@" aangegeven bestand in de bijbehorende CASEDESC.CMT en vervangt dan het teken "@" door een actueel path. Pas daarna wordt de taak opgestart.

Voorbeeld:

Het opstarten van het programma vanuit het CMT gaat als volgt:

```
EDITPROG '\PROG\EDITPROG.EXE \FIXED\BASIS.DAT @WERK.DAT'
```

In DESCROT.CMT geven we op:

```
.....
EDITPROG
I  \FIXED\BASIS.DAT
I  ..\BASECASE\WERK.DAT
```

Het CMT zoekt in de actuele CASEDESC.CMT, in het blok EDITPROG, een naam WERK.DAT en neemt het path over. De aangepaste command line kan er uitzien als volgt: \prog\editprog.exe \fixed\basis.dat \myappl\5\werk.dat

BASIS.DAT hebben we ook in de prototype opgenomen, omdat we willen, dat ook dit bestand door het CMT geregistreerd wordt. Noodzakelijk is het echter niet wat betreft het doorgeven van de bestandsnamen.

4.4.3 Lezen van de bestandsnamen mbv Vervang utility

In de praktijk leest een module de namen van de in- en uitvoerbestanden vaak uit een eigen bestand met een lijst van de bestandsnamen. In dit geval moeten de in CASEDESC.CMT geregistreerde bestandsnamen verwerkt worden in het eigen bestand van de module. Daarvoor zijn twee acties nodig, waar we gebruik maken van Vervang.exe utility van het CMT:

- in het eigen bestand van de module markeren we alle bestandsnamen, die geactualiseerd zullen worden, met een @ teken. Het @-teken vervangt het path. Dit bestand met gemarkeerde bestandsnamen zal vervolgens als een prototype dienen (lijst-prototype).
- voordat de module gestart wordt, draaien we het programma Vervang.exe, dat de gemarkeerde bestandsnamen uit de lijst-prototype vervangt door de voor de case geldige bestandsnamen. Het geactualiseerde bestand wordt dan naar de werk directory geschreven.

De syntax van de command-line voor Vervang.exe is als volgt:

```
VERVANG.EXE CASEDESC.CMT <taak> <lijst-prototype> <geactualiseerde lijst>
```

waar:

- CASEDESC.CMT is een case description bestand voor een lopende case, dat door het CMT in de ..\CMTWORK-directory geplaatst wordt,
- <taak> is een symbolische naam van de taak, waartoe de module toebehoort,
- <lijst-prototype> is een bestand, waar de voor actualisatie bestemde bestandsnamen met een teken "@" aangegeven zijn.
- <geactualiseerd lijst> is een door Vervang.exe geactualiseerd versie van de prototype.

Vervang.exe voert de onderstaande acties uit:

- Vervang.exe leest uit CASEDESC.CMT de bestandsnamen, die bij de gespecificeerde taak opgenomen zijn,
- Vervang.exe leest de lijst-prototype,
- voor elke met "@" aangegeven filenaam uit de lijst-prototype zoekt Vervang.exe het equivalent tussen de bestandsnamen uit CASEDESC.CMT. Daarbij wordt de naam en de extensie vergeleken (geen path).
- de met @ aangegeven bestandsnaam wordt dan met de volledige naam (incl.path) van een equivalent vervangen.
- het op deze manier geactualiseerde lijst-prototype wordt weggeschreven.

De procedure wordt hieronder toegelicht. Als voorbeeld nemen we opnieuw het eerder genoemde programma EDITPROG.EXE.

- a) In CASEDRAW.CMT geven we op (in werkelijkheid op één regel specificeren):

```
EDITPROG
'^CASEMAN\VERVANG.EXE CASEDESC.CMT EDITPROG \PROG\FILELIST.FNM FILE-
LIST.FNM +\PROG\EDITPROG.EXE FILELIST.FNM'
```

Voorbeeld van de inhoud van \PROG\FILELIST.FNM:

```
\FIXED\BASIS.DAT
@WERK.DAT
```

- b) In DESCROT.CMT geven we WERK.DAT op. Het bestand BASIS.DAT willen we deze keer niet registreren. Dit bestand is dus in het CMT onbekend.

```
.....
EDITPROG
I ..\BASECASE\WERK.DAT
```

- c) Op het moment dat de taak opgestart is plaatst het CMT eerst case description CASEDESC.CMT in de ..\CMTWORK. Bijvoorbeeld:

```
.....
EDITPROG
I \MYAPPL\5\WERK.DAT
```

- d) Daarna wordt het commando, zoals in Casedraw.cmt opgegeven, opgestart. Vervang.exe zoekt voor WERK.DAT, dat gelezen is uit \PROG\FILELIST.FNM, dezelfde naam/extensie tussen de bestandsnamen, die bij EDITPROG in CASEDESC.CMT horen en schrijft het geactualiseerde bestand FILELIST.FNM naar de courante werk directory.

<pre>\FIXED\BASIS.DAT \MYAPPL\5\WERK.DAT</pre>
--

- e) Daarna wordt het programma EDITPROG.EXE gestart, dat het actuele lijst met bestandsnamen leest.

4.4.4 Combinatie van de voorgaande methoden.

Alle hiervoor beschreven methoden van het lezen van de bestandsnamen kunnen door een module gecombineerd worden. Een en ander lichten we toe aan de hand van een voorbeeld:

Het programma leest de filenamen vanuit een eigen bestand (INI bestand) en vanuit de CASEDESC.CMT file. CASEDEST.CMT wordt in de eerste bestand vermeldt.

- a) In CASEDRAW.CMT geven we op:
 EDITPROG '\PROG\EDITPROG.EXE \FIXED\EDITPROG.INI'

De inhouden van DESCROT.CMT resp. CASEDESC.CMT zijn gelijk aan die uit het voorgaande voorbeeld. De inhoud van EDITPROG.INI:

EDITPROG	naam, dat in Casedesc.cmt gezocht wordt
CASEDESC.CMT	casedesc.cmt file (overzicht met filenamen)
\FIXED\BASIS.DAT	vaste data
EDITPROG.RTN	andere files (file met return code)
EDITPROG.ALI	andere files (alias-file)

- b) EDITPROG.EXE leest eerst EDITPROG.INI, zoekt daarna in Casedesc.cmt het sleutelwoord EDITPROG en leest vervolgens de bestandsnamen, die onder EDITPROG gespecificeerd zijn

4.5 Selectie uit een lijst

Een taak kan een selectie uit de lijst van de bestanden maken. De geselecteerde bestand(en) kunnen dan door een andere taak gebruikt worden. Het CMT kan de naam van het geselecteerde bestand van de ene taak naar de andere doorgeven en in het case beheer systeem opnemen, mits de onderstaande procedure gevolgd wordt:

- a) Bij taak A, waarin geselecteerd wordt, geven we in de DESCROT.CMT het zoekpatroon op, bijvoorbeeld `<dir>*.MTO, MTODATA.* , *.* , enz.`
- b) bij taak B, die de geselecteerde bestandsnaam moet ontvangen, geven we in DESCROT.CMT een equivalent van het zoekpatroon op, maar nu met een teken # : `<dir>\#.MTO, MTODATA.* , #.#, enz.`
- c) de module van taak A, die uit een lijst selecteert, moet de gemaakte selectie naar zogenaamd alias-bestand schrijven:
 - het alias-bestand moet een extensie .ALI hebben,
 - de naam van het alias-bestand moet hetzelfde zijn als de naam van de taak, waarvan de selecterende module deel uitmaakt.
 - het alias-bestand moet naar `..\CMTWORK` directory geschreven worden,
 - elke regel van het alias-bestand bevat eerst het zoekpatroon en daarna de naam van het geselecteerde bestand. Strings zijn met spaties gescheiden.

Afhandeling van het alias-bestand door het CMT:

- a) als de taak beëindigd is, kijkt het CMT in de `..\CMTWORK`-directory, of daar een `<taak>.ALI` bestand aanwezig is,
- b) zo ja, dan wordt uit het alias-bestand het zoekpatroon en de geselecteerde bestandsnaam gelezen.
- c) in de DESCROT.CMT zoekt het CMT het equivalent van het zoekpatroon op. De geselecteerde bestandsnaam komt op dezelfde plaats, maar nu in CASEDESC.CMT voor de betreffende case, terecht.
Stap b) en c) worden voor elke regel van het alias-bestand herhaald.
- d) Als het gehele alias-bestand gelezen is, wist het CMT dit bestand.

Voorbeeld uit de Demo applicatie:

De taak WATEDIT (de executable Watedit.exe) maakt een lijst van alle .MTO bestanden uit de directory \CMTDEMO\DATA en selecteert vervolgens het 1 bestand, dat in het instrumentarium door de taak WATDIS gebruikt wordt. In dit geval moet het zoekpatroon in het bestand DESCROT.CMT alsvolgt gespecificeerd worden:

```

WATEDIT    0
I  \CMTDEMO\DATA\*.MTO
....
WATDIS     0
I  \CMTDEMO\DATA\#.MTO
....

```

Het zoekpatroon komt in CASEDESC.CMT terecht, omdat het CMT het prototype kopieert voor elke case. Watedit.exe leest het zoekpatroon, maakt een lijst volgens dit zoekpatroon, laat de gebruiker selecteren uit de aangeboden lijst en schrijft de selectie naar een file WATEDIT.ALI als volgt:

zoekpatroon	geselecteerde filenaam
-------------	---------------------------

\CMTDEMO\DATA*.MTO	\CMTDEMO\DATA\YEAR90.MTO
---------------------	--------------------------

De CMT verwerkt de geselecteerde bestandsnaam in de CASEDESC.CMT. Het geselecteerde bestand is vanaf nu voor de case geregistreerd en de taak WATDIS kan de geselecteerde bestandsnaam lezen:

```

WATEDIT    0
I  \CMTDEMO\DATA\*.MTO
....
WATDIS     0
I  \CMTDEMO\DATA\YEAR90.MTO
....

```

De Watedit.exe geeft de gebruiker ook een mogelijkheid een bestandsnaam in te tikken. WATEDIT.ALI kan er dan alsvolgt eruit zien:

\CMTDEMO\DATA*.MTO	\GENERAL\METEO\1990.MTO
---------------------	-------------------------

Indien een taak vanuit verscheidene lijsten selecteert, kan het alias-bestand er als volgt uitzien:

\CMTDEMO\DATA*.MTO	\CMTDEMO\DATA\1990.MTO
\CMTDEMO\PARAM\WIND.*	\CMTDEMO\PARAM\WIND.MIN

4.6 Het werken met een case

In dit hoofdstuk wordt beschreven, hoe de diverse acties van de gebruiker door het CMT intern afgehandeld worden. Een en ander wordt op de demo applicatie \CMTDEMO\MYAPPL toegelicht.

4.6.1 Laden van een case (Import)

De gebruiker laadt een case door een menu optie Import te kiezen, door een case uit de list box te selecteren of , indien geen case geladen is , door dubbel klikken op één van de blokjes. Het CMT voert dan de volgende acties uit:

- maakt de directory ..\WORK en ..\CMTWORK leeg , resp. maakt deze directories aan.
- leest het bestand CASEDESC.CMT voor de geselecteerde case. Daarbij wordt de string "..\" vervangen door de actuele applicatie naam,
- vergelijkt actuele bestandskenmerken (bytes,tijd) met de geregistreerde gegevens.
- laat de status van alle taken op het scherm zien in de bijbehorende kleur.

Voorbeeld:

Bij het selecteren van een case Calibratie 1992 (dit is een case met id 1) wordt het bestand ..\1\casedesc.cmt ingelezen:

```
#Calibratie 1992
#Dit is een calibratie van 1992
WATEDIT 1
I \CMTDEMO\DATA\*.MTO
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT 180 '-1350986664'
IO ..\1\WATDIS.DAT 205 '-1303386318'
O ..\1\WATEDIT.LOG 290 '-1303386318'
WATDIS 1
I \CMTDEMO\DATA\YEAR92.MTO 154 '-1342002288'
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT 180 '-1350986664'
I ..\1\WATDIS.DAT 205 '-1303386318'
O ..\1\DEMAND.RES 273 '-1303386304'
O ..\1\OUTFLOW.RES 273 '-1303386304'
O ..\1\WATDIS.LOG 479 '-1303386304'
WATPRES 1
I ..\1\DEMAND.RES 273 '-1303386304'
I ..\1\OUTFLOW.RES 273 '-1303386304'
RIVEDIT 2
IO ..\10\RIVMOR.DAT 164 '-1303800832'
O ..\#\RIVMOR.LOG
.....
```

Daarbij wordt string "..\" vervangen door \CMTDEMO\MYAPPL.

4.6.2 Starten van een taak

Een taak wordt opgestart door een dubbel klik op een taak. Het CMT voert de onderstaande acties uit:

- controleert of de taak uitgevoerd kan worden (status 1 of 2), of alle I en IO bestanden wel bestaan en of de bestandskenmerken (bytes,tijd) correct zijn. Indien alles ok is, gaat het CMT verder met de volgende acties.
- kopieert IO-bestanden voor desbetreffende taak naar ..\WORK. Echter, dit wordt alleen gedaan indien desbetreffende bestand nog niet in ..\WORK aanwezig is.
- schrijft CASEDESC.CMT naar de directory ..\CMTWORK. Daarin wordt voor alle IO en O bestanden van desbetreffende taak het path vervangen met <application dir>\WORK. Daarmee worden alle nieuwe/gemodificeerde bestanden naar de case werk directory gestuurd.
- vervangt @ indicatie op de command-line met het actuele path,
- start de eerste module uit de command line en onthoudt de unieke 'handle' resp. process id (PID) van deze module.

Voorbeeld:

Als we de taak WATDIS opstarten, levert het de volgende case description in de directory ..\CMTWORK:

```

WATEDIT 1
I \CMTDEMO\DATA\*.MTO
I \CMTDEMO\MYAPPL\FIXED\CROPFIL.DAT
IO \CMTDEMO\MYAPPL\1\WATDIS.DAT
O \CMTDEMO\MYAPPL\1\WATEDIT.LOG
WATDIS 1
I \CMTDEMO\DATA\YEAR92.MTO
I \CMTDEMO\MYAPPL\FIXED\CROPFIL.DAT
I \CMTDEMO\MYAPPL\1\WATDIS.DAT
O \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\DEMAND.RES
O \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\OUTFLOW.RES
O \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\WATDIS.LOG
WATPRES 1
I \CMTDEMO\MYAPPL\1\DEMAND.RES
I \CMTDEMO\MYAPPL\1\OUTFLOW.RES
RIVEDIT 2
IO \CMTDEMO\MYAPPL\10\RIVMOR.DAT
O \CMTDEMO\MYAPPL\#\RIVMOR.LOG
.....

```

De modules, opgenomen onder taak WATDIS, kunnen nu hun bestandsnamen uit het datablok WATDIS betrekken.

Echter, andere taken zullen niet altijd de juiste bestandsnamen bevatten en we moeten dus op dit moment beslist geen bestandsnamen lezen uit een ander blok dan WATDIS.

4.6.3 Beëindigen van een taak

Het CMT controleert in regelmatige intervallen, of de 'handle' resp. process id (PID) van de opgestarte module in het systeem nog bestaat. Indien niet, betekent dit voor het CMT, dat de module beëindigd is. Het CMT zoekt dan het bestand <taak>.RTN en leest de return code.

a) *Return code = NoChange* (geen wijziging in de taak)

In dit geval worden verder geen acties uitgevoerd.

b) *Return code = OK en Return code = error*

- voor IO en O bestanden van de desbetreffende taak wordt het path definitief vervangen door het path <application dir>\WORK,
- het vervangen van het path door <application dir>\WORK gebeurt ook voor alle andere voorkomens van bovengenoemde bestanden in de hele case description.
- nieuwe bestandskenmerken worden opgevraagd,
- bestandsnamen uit een alias file worden verwerkt en hun kenmerken opgevraagd.
- de status van desbetreffende taak en van afhankelijke taken wordt bepaald.

Voorbeeld:

Het beëindigen van de taak WATDIS (met de code OK) levert de onderstaande case description (in CMT geheugen, niet in een bestand):

```

WATEDIT 1
I \CMTDEMO\DATA\*.MTO
I \CMTDEMO\MYAPPL\FIXED\CROPFIL.DAT
IO \CMTDEMO\MYAPPL\1\WATDIS.DAT
O \CMTDEMO\MYAPPL\1\WATEDIT.LOG
WATDIS 1
I \CMTDEMO\DATA\YEAR92.MTO
I \CMTDEMO\MYAPPL\FIXED\CROPFIL.DAT
I \CMTDEMO\MYAPPL\1\WATDIS.DAT
O \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\DEMAND.RES
O \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\OUTFLOW.RES
O \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\WATDIS.LOG
WATPRES 2
I \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\DEMAND.RES
I \CMTDEMO\MYAPPL\WORK\OUTFLOW.RES
RIVEDIT 2
IO \CMTDEMO\MYAPPL\10\RIVMOR.DAT
O \CMTDEMO\MYAPPL\#\RIVMOR.LOG

```

.....

4.6.4 Opslaan van een case onder andere naam (Save As)

Save As en Save acties kan de gebruiker alleen uitvoeren indien geen van de taken draait. Nadat de gebruiker de menu optie Save As gekozen heeft en de korte case beschrijving opgegeven heeft, voert het CMT de onderstaande acties uit:

- genereert het nieuwe case identificatie nummer (case-id),
- wijzigt de bestandsnamen in de case description als volgt:
 - markeert alle bestandsnamen, die niet geldig zijn, met een "niet-in-gebruik" teken "#". Het gaat om de O bestanden van de taken met de status anders dan 1.
 - case werk path <application dir>\WORK wordt vervangen door het path <applicati-on>\case-id,
- schrijft case description naar het bestand ..\WORK\CASEDESC.CMT
- hernoemt ..\WORK directory naar ..\case-id .
- actualiseert het bestand REGISTER.CMT. Nieuwe bestanden worden toegevoegd, de teller van de bestanden, die reeds in de register opgenomen zijn, wordt verhoogd.

Voorbeeld:

Het opslaan van onze case (als Tweede calibratie 1992) levert de onderstaande CASEDESC.MT in directory ..\2 (2 is door het CMT gegenereerd).

```
#Tweede calibratie 1992
#Dit is een tweede calibratie van 1992
WATEDIT 1
I \CMTDEMO\DATA\*.MTO
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT 180 '-1350986664'
IO ..\1\WATDIS.DAT 205 '-1303386318'
O ..\1\WATEDIT.LOG 290 '-1303386318'
WATDIS 1
I \CMTDEMO\DATA\YEAR92.MTO 154 '-1342002288'
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT 180 '-1350986664'
I ..\1\WATDIS.DAT 205 '-1303386318'
O ..\2\DEMAND.RES 273 '-1303219552'
O ..\2\OUTFLOW.RES 273 '-1303219552'
O ..\2\WATDIS.LOG 479 '-1303219552'
WATPRES 2
I ..\2\DEMAND.RES 273 '-1303219552'
I ..\2\OUTFLOW.RES 273 '-1303219552'
RIVEDIT 2
IO ..\10\RIVMOR.DAT 164 '-1303800832'
O ..\#\RIVMOR.LOG
.....
```


4.6.5 Opslaan van een case (Save)

Met de optie Save wil de gebruiker een case overschrijven. Voor zijn gevoel zijn dan de oorspronkelijk bestanden met de nieuwe data overgeschreven. Echter, een bestand kan niet zo maar overgeschreven worden, omdat deze immers ook in andere cases gebruikt kan worden. Daarom behandelt het CMT de Save-actie als volgt:

- het CMT bewaart eerst de case met Save As,
- daarna wordt de oorspronkelijke case gewist (zie Delete menuoptie).

Omdat de korte case beschrijving hetzelfde blijft, merkt de gebruiker niets van deze twee-stappen actie.

4.6.6 Verlaten van een case (Leave)

Met Leave worden alle wijzigingen in een case vergeten. Alle bestanden, die in de directories ..\WORK en ..\CMTWORK aangemaakt zijn, worden gewist.

4.6.7 Wissen van een case (Delete)

Bij het kiezen van een Delete optie doet het CMT het volgende:

- leest REGISTER.CMT en de CASEDESC.CMT voor de te wissen case,
- voor elk bestand, dat in de case gebruikt was, verlaagt het CMT de teller in de register,
- bestanden met een teller gelijk aan nul worden uit het register en van de schijf gewist. Daarbij geldt, dat alleen "private variable" bestanden van de schijf gewist worden.
- CASEDESC.CMT wordt uit de bijbehorende case directory gewist.

Tijdens de Delete-procedure volgt het CMT de consistentie van de informatie in de Register.cmt, Casedesc.cmt en in de case directory. Mocht het CMT onregelmatigheden aantreffen, verschijnt één of meer van de onderstaande boodschappen:

- *File is used in no case. The file was deleted.*
Het CMT heeft bemerkt, dat in de case directory zich een bestand bevindt, dat niet in de register voorkomt, dus in geen case gebruikt wordt. Het CMT wist dit bestand.
- *File was present in the case directory but not in the register.*
Het CMT heeft bemerkt, dat in Casedesc.cmt voor desbetreffende case een bestand is opgenomen, dat in de register ontbreekt.
- *File does not exist.*
Het CMT heeft een bestand met de teller = 0 geprobeerd te wissen, maar deze bestaat niet.

De boodschappen kunnen erop wijzen, dat de applicatie niet helemaal correct in de sturingfiles opgegeven is.

De betrokken bestanden verschijnen in een list box. Als we op een bestand klikken, verschijnt de bijbehorende boodschap in een tekst veld onder de list box (zie volgende pagina).

4.6.8 Batch mode (Define Batch)

Met batch mode kunnen we een serie van de taken definiëren, die allemaal uitgevoerd moeten worden. De taken worden dan automatisch opgestart, zonder dat we op elke taak moeten klikken. We komen in de batch mode door de menuoptie Case -> define Batch te kiezen. De batch mode heeft drie toestanden: define batch, run batch en quit batch.

Define Batch

Nadat we de menuoptie Define batch gekozen hebben, kunnen we een willekeurige taak aanklikken. Om de taak heen verschijnt dan een omlijsting om aan te geven, dat de taak voor de batch geselecteerd is. Als we de taak uit de batch willen halen, klikken we opnieuw op hetzelfde taak en de omlijsting verdwijnt. De taken kunnen we in willekeurige volgorde aanklikken.

Als we op dit moment de batch mode willen verlaten, doen we dat als volgt: eerste halen we alle taken uit de batch en dan kiezen we de menu optie Case -> Run Batch. Omdat geen taken voor de batch geselecteerd zijn, komen we direct in de normale toestand. Alle menuopties worden weer actief.

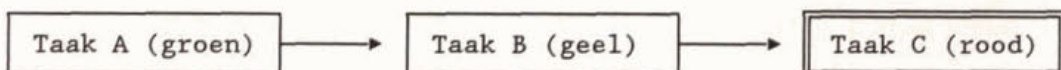
Wij kunnen de batch mode alleen beginnen, indien geen van de taken draait.

Run Batch

Met de menu optie Case -> Run Batch starten we de taken in de batch. Het CMT zorgt er zelf voor, dat de taken in de juiste volgorde opgestart worden. Het CMT kan ook twee taken tegelijk opstarten, als dit mogelijk is.

Nadat de laatste taak opgestart is, komt het CMT van zelf in de normale toestand.

Het is ook denkbaar, dat we de taken voor de batch onlogisch definiëren, bijvoorbeeld:



In bovenstaande voorbeeld kan de taak C in de batch nooit uitgevoerd worden, omdat deze van de taak B afhankelijk is en de taak B niet in de batch zit. In zo'n geval blijft het CMT in de run-mode en we moeten zelf de batch mode beëindigen door de optie Case -> Quit Batch te kiezen.

Quit Batch

Met de menu optie Quit Batch kunnen we de batch op een willekeurige punt afbreken. Alle resterende taken worden dan uit de batch gehaald en de batch mode eindigt onmiddellijk. De reeds draaiende taken worden ongemoeid gelaten.

4.7 Dynamic Data Exchange (DDE) in het CMT voor MS-Windows

Het CMT voor MS-Windows biedt een mogelijkheid om de DDE opdrachten te versturen naar een andere applicatie.

Bij het opstarten van een programma vanuit het CMT wordt deze altijd opnieuw in het geheugen geladen. Maar dit is niet altijd gewenst of mogelijk. Soms willen we een programma éénmalig laden en dan alleen op aangegeven momenten tot actie laten komen. MapInfo als GIS systeem is een voorbeeld van zo'n programma. Éénmaal geladen, kunnen we de boodschappen naar MapInfo versturen, bijvoorbeeld welke gegevens in welke kaarten we willen zien. Andere programma's die de DDE ondersteunen zijn bijvoorbeeld Excel, Word for Windows. Met MS-Windows Program Manager kunnen we ook via DDE communiceren.

Het huidige CMT ondersteunt slechts een deel van de DDE mogelijkheden, namelijk het versturen van een opdracht en het opvragen van data. Deze functionaliteit ligt in dezelfde lijn als de eerder beschreven procedure voor het opstarten van een module en opvragen van de module handle resp. process id.

4.7.1 Syntax van een DDE opdracht

Om de DDE communicatie tussen het CMT en een andere applicatie tot stand brengen, moet de gebruiker op de hoogte zijn van de mogelijkheden, die de desbetreffende applicatie op het gebied van DDE biedt. De gebruiker moet weten, welke commando's de applicatie accepteert en wat de mogelijke "topics" en "items" van de communicatie zijn. In deze documentatie wordt niet op de concepten van de DDE ingegaan.

Een DDE opdracht specificeren we op de command line, in het bestand CASEDRAW.CMT:

```
TAAK1 'DDE: <server> | <topic> | <command> | <item> | <expected answer>'
```

De DDE opdracht moet altijd met de indicatie 'DDE:' beginnen. Daarna volgen de onderstaande componenten, gescheiden met het teken '|':

<server>

is de naam van het programma, dat de opdracht moet ontvangen. Het programma specificeren we zonder path.

<topic>

is het onderwerp van de communicatie. Het kan een data eenheid zijn of een bestandsnaam.

<command>

is de opdracht.

<item>

is de identificatie van de data, waarmee we willen aangeven, dat de communicatie beëindigd dient te worden.

<expected answer>

is de waarde van <item>, waarbij de communicatie beëindigd wordt.

Op één command line in het bestand CASEDRAW.CMT mogen DDE opdrachten met andere opdrachten gecombineerd worden. Indien een bestandsnaam een onderdeel van een opdracht uitmaakt, mag de bestandsnaam met het teken '@' aangegeven worden.

4.7.2 Afhandeling van de DDE communicatie

Bij het opstarten van een taak met een DDE opdracht legt het CMT eerst de verbinding tussen de opgegeven server en topic. Als dit niet lukt, bijvoorbeeld omdat de server niet geladen is, krijgt de gebruiker een boodschap en de status van de taak wordt 2 (taak was met een fout beëindigd, moet opnieuw uitgevoerd worden).

Nadat de verbinding gelegd is, stuurt het CMT de opdracht naar de server en zet de status van de taak op 'taak draait'. Vervolgens controleert het CMT in de periodieke intervallen, of de waarde van 'item' een verwachte antwoord, een 'expected answer' bevat. Zo ja, dan betekent dat voor het CMT, dat de taak beëindigd is. De status van de taak wordt door het CMT op 1 gezet (beëindigen zonder fout) en het CMT stuurt een boodschap naar de server, dat de communicatie beëindigd is.

De communicatie kan ook tussentijds door de server beëindigd worden, omdat de gebruiker bijvoorbeeld het server-programma sluit. In dit geval beëindigd ook het CMT de verbinding met de server.

4.7.3 Voorbeeld van een DDE toepassing

Het gebruik van de DDE opdrachten in het CMT wordt op een demo applicatie \CMTDEMO\DDEAPPL toegelicht.

Eerst starten we twee programma's, waarmee het CMT in onze demo applicatie gaat communiceren (zie afbeelding op de volgende pagina) :

\cmtdemo\programs\ddeprog1.exe en \cmtdemo\programs\ddeprog2.exe.

Over Ddeprog1.exe is bekend, dat:

- de topic van de communicatie heet 'home',
- de commando's, die geaccepteerd worden zijn: max, min, blue, white (maximaliseer, minimaliseer de window, zet window kleur op blauw resp.wit),
- het item van de communicatie heet 'text1' (=naam van een tekst veld),
- de waarde van text1 'ok' moet zijn, als de communicatie beëindigd dient te worden. Dit mag een getal of een string zijn, grote/kleine letters zijn significant.

Over Ddeprog2.exe is bekend, dat:

- de topic van de communicatie heet 'winA' en 'winB',
- de commando's, die geaccepteerd worden zijn: max, min, blue, white,
- het item van de communicatie heet 'text1' (=naam van een tekst veld),
- de waarde van text1 'END' moet zijn, als de communicatie beëindigd dient te worden.

Wij maken een applicatie met drie taken. De eerste taak minimaliseert de window van Ddeprog1.exe, de tweede taak verandert de kleur van winB van Ddeprog2.exe in blauw. Als deze twee taken uitgevoerd zijn, zal de derde taak eerst de kleur van winB in wit veranderen en daarna de window van Ddeprog1 maximaliseren.

Voor elk actie moeten we aangeven, wanneer deze beëindigd is. we kiezen voor het volgende : zolang de tekst in het tekstveld 'text1' anders is dan 'ok' (bij Ddeprog1) resp. anders is dan 'END' (bij Ddeprog2) betekent dat voor het CMT, dat de acties in desbetreffende programma's nog lopen (de taken draaien nog).

Dit is de bijbehorende CASEDRAW.CMT:

```

3 'DDE Demo Application' 'DDE Demo Application'
; Per taak de opstart opdracht
TASK1 'DDE:ddeprog1|home|min|tekst1|ok'
TASK2 'DDE:ddeprog2|winB|blue|tekst1|END'
TASK3 'DDE:ddeprog2|winB|white|tekst1|END +DDE:ddeprog1|home|max|tekst1|ok'
;
0 0 100 100 ;definieren van het scherm (voorlopig n.v.t.)
TASK1 'DDEprog1 min' 'task1' 20 20 40 40
TASK2 'WindowB blue' 'task2' 60 20 80 40
TASK3 'WindowB white + DDEprog1 max' 'task3' 20 70 85 85
;
TASK1 1 TASK3
TASK2 1 TASK3
TASK3 0
;
TASK1
2 30 43 30 67
TASK2
2 70 43 70 67
TASK3

```

Nu starten we het CMT: \Caseman\caseman.exe \cmtdemo\ddeappl

Op het scherm verschijnt de applicatie window, zoals op de volgende pagina afgebeeld. Wij importeren de aanwezige case en klikken dubbel op de taken, waarna de acties uitgevoerd worden. Daarna tikken we in het veld 'text1' van Ddeprog1 en string 'ok', en in het veld 'tekst1' van de window winB een string 'END'. Omdat dit voor het CMT het verwachte antwoord is, zet het CMT de kleur van de taken op groen - de taken zijn beëindigd.

5 Initialisatie van het case beheer

In dit hoofdstuk wordt beschreven, op welke manier het case beheer van een applicatie geïnitieerd moet worden. In feite gaat het om het handmatig aanmaken van de eerste case. De procedure wordt op de voorbeeld-applicatie \CMTDEMO\MYAPPL toegelicht.

Volg de onderstaande stappen om het case beheer van een applicatie te initialiseren:

1. Je hebt een applicatie directory aangemaakt \CMTDEMO\MYAPPL, en naar behoefte andere subdirectories (zoals \CMTDEMO\MYAPPL\FIXED voor de "private fixed" bestanden en een directory \CMTDEMO\DATA voor de "public" bestanden). In de applicatie directory moeten zich de volgende bestanden bevinden: CASEDRAW.CMT, DESCROT.CMT, CMT.INI, CAPTIONS.LNG, ERRORS.LNG.
2. Maak in de applicatie directory de bestanden CASELIST.CMT en REGISTER.CMT aan. Kies een willekeurige nummer als case-id (10 bijvoorbeeld). Elk bestand heeft 1 regel met de volgende inhoud:

CASELIST.CMT:

10 'Basecase-initiële situatie'

REGISTER.CMT:

0

3. Maak de eerste case subdirectory aan. De naam moet gelijk aan case-id (=10) zijn: \CMTDEMO\MYAPPL\10.
4. In de subdirectory \CMTDEMO\MYAPPL\10 moeten alle invoerbestanden van het type "private variabele" staan, die initieel aanwezig moeten zijn. Het gaat om de bestanden uit DESCROT.CMT met de identificatie I of IO, met path..\BASECASE en die in beginsel door geen taak gegenereerd worden.

Voor onze voorbeeld applicatie is de verdeling van de data bestanden over de directories nu als volgt :

in de directory \CMTDEMO\DATA zijn alle bestanden met de extensie .MTO. In de directory \CMTDEMO\MYAPPL\FIXED zijn de bestanden Cropfil.dat en Watqual.dat. In de directory \CMTDEMO\MYAPPL\10 zijn de bestanden Watdis.dat en Rivmor.dat.

5. Kopieer het bestand DESCROT.CMT naar de subdirectory ..\10 onder de naam CASEDESC.CMT. Vervang in het bestand CASEDESC.CMT de naam "BASECASE" in "#". Voor de bestanden, die zich in de subdirectory ..\10 bevinden, vervang "BASECASE" door het getal 10. Wis de commentaar strings en indicatie N uit het bestand.

6. Verander voor elke taak de status "0" als volgt: de taken die aan het begin van het traject staan en van geen andere taak afhankelijk zijn, krijgen de status 2 (=kan uitgevoerd worden). Alle andere taken krijgen de status 4 (=kan niet uitgevoerd worden).

Voor onze voorbeeld ziet er CASEDESC.CMT nu als volgt:

```
# short case description
# long case description
WATEDIT 2
I \cmtdemo\data\*.MTO
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT
IO ..\10\WATDIS.DAT
O ..\#\WATEDIT.LOG
WATDIS 4
I \cmtdemo\data\#.MTO
I ..\FIXED\CROPFIL.DAT
I ..\10\WATDIS.DAT
O ..\#\DEMAND.RES
O ..\#\OUTFLOW.RES
O ..\#\WATDIS.LOG
WATPRES 4
I ..\#\DEMAND.RES
I ..\#\OUTFLOW.RES
RIVEDIT 2
IO ..\10\RIVMOR.DAT
O ..\#\RIVMOR.LOG
RIVMOR 4
I ..\#\OUTFLOW.RES
I ..\10\RIVMOR.DAT
O ..\#\RIVMOR.RES
WATQUAL 4
I ..\FIXED\WATQUAL.DAT
I ..\#\OUTFLOW.RES
O ..\#\CONCENTR.RES
RIVPRES 4
I ..\#\RIVMOR.RES
QUALPRES 4
I ..\#\CONCENTR.RES
```

7. Start de CMT als volgt: \CASEMAN\CASEMAN.EXE \CMTDEMO\MYAPPL
Op het scherm verschijnt de CMT window.
8. Kies de menu opties 'Case' en daarna 'Import'. De taken (blokjes) met de status 2 hebben nu een gele kleur gekregen, alle andere een rode kleur.
9. Kies de menu opties 'Case' en daarna 'Save as...'. Op het scherm verschijnt een save-dialog. Geef de korte casebeschrijving (Basecase bijvoorbeeld) op en klik op OK.
10. Verlaat het CMT door de menu optie 'Case' en daarna 'Exit' te kiezen.
11. Ga naar de applicatie directory (\CMTDEMO\MYAPPL). De CMT heeft de nieuwe subdirectory (.1 in ons voorbeeld) gegenereerd, waarin zich alleen het bestand CASEDESC.CMT bevindt. Kopieer dit bestand naar de directory 10 (overschrijf het oude bestand). Wis vervolgens de subdirectory '1'.

12. Wijzig het bestand CASELIST.CMT in de directory \CMTDEMO\MYAPPL. Dit bestand is door de CMT aangepast en ziet er als volgt uit:

```
10 'Basecase - Initiële situatie'  
1 'Basecase'
```

Wijzig het bestand in:

```
10 'Basecase'
```

13. Controleer eventueel het bestand REGISTER.CMT. In dit bestand moeten alle "public files" en "private fixed files" uit CASEDESC.CMT staan, en verder alle data bestanden uit de initiële case directory (10).

Voor onze voorbeeld ziet er dit bestand als volgt uit:

```
4  
1 .. \FIXED\CROPFIL.DAT  
1 .. \10\WATDIS.DAT  
1 .. \10\RIVMOR.DAT  
1 .. \FIXED\WATQUAL.DAT
```

14. Nu is de applicatie \CMTDEMO\MYAPPL geïnitieerd. Start de CMT opnieuw en in het case overzicht verschijnt de case 'Basecase'.

6 Beperkingen

Het CMT werkt met de dynamische geheugen allocatie. Afhankelijk van het aantal elementen (taken, bestanden, enz.) in de applicatie wordt het benodigde geheugen gereserveerd. Mocht er een conflict ontstaan tussen het aantal elementen en de geheugen, dan krijgt de gebruiker een boodschap daarover.

De hier genoemde beperkingen hebben betrekking op de lengte van diverse strings. De gebruiker moet zelf zorgen, dat deze grenzen niet overschreden worden. Het CMT controleert dit niet, behalve in enkele uitzonderingen. Mocht het noodzakelijk zijn, dan kan de lengte van de strings makkelijk veranderd worden door de gebruikte parameters en data typen aan te passen.

Hieronder de maximale lengtes van diverse strings:

- 500 Maximale lengte van één regel in alle bestanden.
- 80 Maximale lengte van één regel van lange case beschrijving. Indien de gebruiker een langere regel intikt, wordt deze afgekapt. (Lange case beschrijving mag uit verscheidene regels van max.80 tekens bestaan).
- 81 Maximale lengte van een korte case omschrijving. Indien de gebruiker langere string opgeeft, wordt deze afgekapt.
- 500 Maximale lengte van de command-line, opgegeven in het bestand Casedraw.cmt. Deze maximum geldt tevens voor het gemodificeerde command-line, na het vervangen van de teken '@' met de actuele path. In het tweede geval controleert het CMT wel de totale lengte.
- 120 Maximale lengte van een boodschap-string uit de bestanden Captions.lng en Errors.lng.
- 200 Maximale lengte van een boodschap, dat zichtbaar zal zijn in het zogenaamde message-box. Langere strings worden afgekapt.
- 80 Maximale lengte van een applicatie titel, opgegeven in Casedraw.cmt.
- 40 Maximale lengte een taak omschrijving, opgegeven in Casedraw.cmt.
- 12 Maximale lengte van een bestandsnaam.
- 4 Maximale lengte van de bestand extensie, incl. de punt.
- 80 Maximale lengte van een directory.
- 80 Maximale lengte van een bestandsnaam incl. de directory.
- 9 Maximale lengte van een symbolische taak naam.

7 Utilities

7.1 Functies voor het opvragen van geregistreeerde case informatie

Voor het CMT is een aantal functies geschreven, waarmee de ontwerper diverse informatie kan opvragen vanuit de CMT sturings/registratie-bestanden Casedraw.cmt, Descprot.cmt en Casedesc.cmt. Deze functies kunnen vanuit de eigen programmatuur van de gebruiker aangeroepen worden. Op dit moment zijn de onderstaande libraries beschikbaar:

Cmtfunc.lib - library met functies voor DOS,
Cmtfunc.dll - library met functies voor MS-Windows

In de onderstaande hoofdstukken worden de functie beschreven.

7.1.1 GETSCN functie (Get Case)

Subroutine GETSCN

(application, task_name, desc_length, list_length,
ncase_valid, case_id, case_listing, status)

Subroutine returns, for the given application directory and given task, case identification and case description of the existing cases. The subroutine works on the Case Management tool (CMT) files.

Application directory is a directory where the CMT description files (casedraw.cmt ...) of the given application are stored. Task is a symbolic name of a action as specified in the CMT file casedesc.cmt.

Arguments (I=input, IO=input/output, O=output):

I string	application	-	application directory. Specify as : \directory or \directory\subdir and so on without the last (back)slash.
I string	task_name	-	symbolic name of a task (in capitals) If the task is a null string, all existing cases in the given application are returned.
I int*2	desc_length	-	max.length of the short case description.
I int*2	list_length	-	length of the arrays case_id and case_listing
O int*2	ncase_valid	-	number of existing cases,
O int*2	case_id	-	array of case id's,
O string	case_listing	-	array of short case descriptions,
O int*2	status	-	return code: 0 = ok > 0 error (see errors description file)

Example for Visual Basic

```
Type case_desc
  description As String * 81
End Type
```

```
Declare Sub GETSCN Lib "ods01.dll" (
  ByVal application As String,
  ByVal task_name As String,
  ByVal desc_length As Integer,
  ByVal list_length As Integer,
  ncase_valid As Integer,
  case_id As Integer,
  case_listing As case_desc,
  status As Integer)
```

Call of the subroutine:

Case_id (.) and case_listing(.) are arrays with dimensions from 1 to list_length. Arrays must be long enough to store all returned filenames. Description length (idummy) is not used.

```
Call GETSCN ( application, task_name, idummy, list_length, ncase,
             case_id (1), case_listing(1), status)
```

Example for C

```
typedef struct CASE_DESC
{
  char desc[81];
} CASE_DESC;
```

Call of the subroutine: arrays must be long enough to store all returned filenames. Filename length (idummy) is not used.

```
GETSCN ( application, task_name, idummy, list_length, &ncase_valid,
        case_id, case_desc, &status);
```

7.1.2 GETTSK functie (Get Task)

Subroutine GETTSK (
 application, case_id, task_length, desc_length,
 list_length, ntask, task_list, desc_list, status)

Subroutine returns, for the given application directory and the given case number, the names and descriptions of the valid tasks (= tasks with the status "done"). Task descriptions will be returned in the required language. The subroutine works on the Case Management tool (CMT) files.

Application directory is a directory where the CMT description files (casedraw.cmt ...) of the given application are stored. Task is a symbolic name of a action as specified in the CMT file casedesc.cmt.

Arguments (I=input, IO=input/output, O=output):

I string	application	-	application directory. Specify as : \directory or \directory\subdir and so on without the last (back)slash.
I int*2	case_id	-	case number = valid number: return tasks for this case = 0 : return all tasks in the given application.
I int*2	task_length	-	max.length of the task name.
I int*2	desc_length	-	max.length of the task description,
I int*2	list_length	-	length of the arrays task_list and desc_list
O int*2	ntask	-	number of valid tasks,
O string	task_list	-	list of task names,
O string	desc_list	-	list of task descriptions
IO int*2	status	-	on input language nummer (0 or 1) on output return code: 0=ok > 0 error (see errors description file)

Example for Visual Basic

```
Type task_list
  taskname As String * 9
End Type
```

```
Type language
  tekst As String * 121
End Type
```

```
Declare Sub GETTSK Lib "ods01.dll" (
  ByVal application As String,
  ByVal case_id As Integer,
  ByVal task_length As Integer,
  ByVal desc_length As Integer,
  ByVal list_length As Integer,
  ntask As Integer,
  task_list As task_list,
  desc_list As language,
  status As Integer)
```

Call of the subroutine:

task_list(.) and desc_list(.) are arrays with dimensions from 1 to list_length. Arrays must be long enough to store all returned tasks. Task length (idummy) is not used.

```
Call GETTSK ( application, case_id, idummy, idummy, list_length,
  ntask, task_list(1), desc_list(1), status)
```

Example for C

```
typedef struct TASK
{
  char name[9];
} TASK;
```

```
typedef struct LANGUAGE
{
  char tekst[121];
} LANGUAGE;
```

Call of the subroutine : Arrays must be long enough to store all returned tasks.
Filename/description length (idummy) is not used.

```
GETTSK (application, case_nr, idummy, idummy, list_length,
  &ntask, task_list, desc_list, &status);
```

7.1.3 GETFLN functie (Get Filename)

Subroutine GETFLN (
application, case_id, mark, task_name, file_type,
fname_length, desc_length, list_length,
nfile, file_list, desc_list, status)

Subroutine can be used in two ways:

1. Case_id is greater than zero.

Subroutine returns, for the given application directory and the given case number, full names and descriptions of all files that satisfy the following conditions:

- the name of the file contains the string "mark",
- the file belongs to the task "task_name",
- the file type is equal to "file_type",
- the file exists.

File descriptions will be returned in the required language.

The subroutine works on the Case Management tool (CMT) files. Application directory is a directory where the CMT description files (casedraw.cmt ...) of the given application are stored. Task is a symbolic name of a action as specified in the CMT file casedesc.cmt. If one of the arguments "mark", "task_name" or "file_type" is a null string, all files that satisfy the other conditions are returned. Filenames containing character '*' will be ignored. The files, that are marked with character N in the case description prototype (descprot.cmt), will be never returned.

2. Case_id is equal to / less than zero

Subroutine returns all files in the given directory "application" and its subdirectories, that satisfy the search criterium "mark". The search criterium must be valid for the operating system (*.ext, name.* and so on). Returned file descriptions are equal to the file names. Arguments "task_name" and "file_type" are not significant.

Arguments (I=input, IO=input/output, O=output):

I string application - (application)directory. Specify as :
 \directory or \directory\subdir and so on
 without the last (back)slash.

I int*2 case_id - case number,
 I string mark - string to be searched in the filename or
 search criterium.

I string task_name - name (in capitals) of a task in the given
 application,

I string file_type - file type (I=input file,IO=input/output file
 O=output file).

I int*2 fname_length - max.length of the filename,
 I int*2 desc_length - max.length of the file description,
 I int*2 list_length - length of the arrays file_list and desc_list

O int*2 nfiles - number of files that satisfied the conditions,
 O string file_list - list of filenames that satisfied the conditions.
 O string desc_list - list of file descriptions

IO int*2 status - on input language nummer (0 or 1)
 on output return code: 0=ok
 > 0 error (see errors
 description file)

Example for Visual Basic

```
Type file_list
  filename As String * 81
End Type
```

```
Type language
  tekst As String * 121
End Type
```

```
Declare Sub GETFLN Lib "ods01.dll" (
  ByVal application As String,
  ByVal case_id As Integer,
  ByVal mark As String,
  ByVal task_name As String,
  ByVal file_type As String,
  ByVal fname_length As Integer,
  ByVal desc_length As Integer,
  nfiles As Integer,
  file_list As file_list,
  desc_list As language,
  status As Integer)
```

Call of the subroutine:

File_list(.) and desc_list(.) are arrays with dimensions from 1 to list_length. Arrays must be long enough to store all returned filenames resp. file descriptions. Filename length and description length (idummy) are not used.

```
Call GETFLN ( application, case_id, mark, task_name, file_type,
            idummy, idummy, list_length, nfile, file_list(1),
            desc_list(1), status)
```

Example for C

```
typedef struct FILE_LIST
{
    char filename[81];
} FILE_LIST;
```

```
typedef struct LANGUAGE
{
    char tekst[121];
} LANGUAGE;
```

Call of the subroutine : arrays must be long enough to store all returned filenames. Filename/description length (idummy) is not used.

```
GETFLN (application, case_nr, mark, task_name, file_type,
        idummy, idummy, list_length, &nfile, file_list,
        desc_list, &status);
```

7.2 CMDESIGN utility

CMDESIGN is een programma, waarmee de gebruiker interactief de CMT applicatie opbouwen of veranderen kan. Dit doet de gebruiker door het applicatie-schema op het scherm te tekenen en aan de taken de eigenschappen toe te kennen.

Eerste versie van deze utility zal alleen voor MS-Windows beschikbaar zijn en de ontwikkeling daarvan is van een groot gedeelte afgerond.

7.3 CMUPDATE utility

CMUPDATE is een programma, waarmee de gebruiker de wijzigingen in de bestaande CMT applicatie verwerken kan. Met wijzigingen verstaan we voornamelijk het toevoegen en/of weglaten van de taken en bestanden. Deze ingrepen vereisen namelijk, dat alle bestaande cases herzien moeten worden.

Het programma kan los gebruikt worden of in aansluiting op CMDESIGN en zal voor MS-Windows en UNIX platform beschikbaar zijn.

Deze utility is in ontwikkeling.

Bijlage B Simulatiemodellen

Bijlage B.1 MODGRID

MODGRID

Een WL-dataprocessor voor MODFLOW en
vergelijkbare numerieke grondwatermodellen

Programmabeschrijving en Menubeschrijving

Concept

INHOUDSOPGAVE

DEEL 1 Programmabeschrijving voor de dataprocessor MODGRID	1 – 1
1 Afleiden van ruimtelijke discretisatie van het te modelleren onderzoeksgebied	1 – 1
2 Vertaling van beschikbare (veld-)gegevens in termen van modelparameters	1 – 4
3 Presentatie en analyse van invoergegevens en berekeningsresultaten	1 – 7
4 Aanpassing van parameterwaarden	1 – 11
6 Hoe kan MODGRID gebruikt worden bij het afleiden van detailmodellen?	1 – 14
7 Filosofie achter verticale schematisatie	1 – 14
 DEEL 2 Menubeschrijving voor de dataprocessor MODGRID	 1 – 16
Hoofdmenukeuze 1: FILES	1 – 17
1.1 New Case ...	1 – 17
1.2 Import MODFLOW Input Set	1 – 17
1.3 Import Generic Data Set	1 – 18
1.4 Subset Output (Parallel)	1 – 18
1.5 Subset Output (Oblique)	1 – 18
1.6 Generate MODFLOW Input	1 – 19
1.7 Vector GIS output	1 – 19
1.8 SURFER Grid File Output	1 – 20
1.9 STYXZ Format File Output	1 – 20
1.10 STYXZ Water Balance Files	1 – 20
1.11 MODPATH Input Files	1 – 21
1.12 Quit MODGRID	1 – 21
Hoofdmenukeuze 2: GRID	1 – 22
2.1 Insert Grid Lines	1 – 22
2.2-2.4 Cross-section XY/XZ/YZ	1 – 23
2.5 Zoom Subarea	1 – 23
2.6-2.8 Zoom Current Cross-Section XY / XZ / YZ	1 – 23
2.9 Undo Zoom	1 – 23
Hoofdmenukeuze 3: DATA	1 – 24
3.1 Set Active Parameter	1 – 24
3.2 Set Contour Levels	1 – 24
3.3 Set Value	1 – 25
3.4 Modify (Substitute Value)	1 – 25
3.5 Modify (Construct Value)	1 – 26
3.6 Modify (Add Value)	1 – 26
3.7 Modify (Multiply Value)	1 – 26
3.8 Interpolate Cross-section	1 – 26
3.9 Copy Cross-Section	1 – 27
3.10 Copy Computed Head	1 – 27
3.11 Compute Velocities	1 – 27

Hoofdmenukeuze 4	SELECT	1 — 28
4.1	Select Individual	1 — 28
4.2	Select Block	1 — 28
4.3	Select Polygon	1 — 29
4.4	Select on Condition	1 — 29
4.5	Select Cross-Section	1 — 29
4.6	Select All	1 — 29
4.7	Store as Named Area	1 — 30
4.8	Retrieve Named Area	1 — 30
4.9	Toggle XOR mode ON/OFF	1 — 30
4.10	Extremes in Subset	1 — 30
4.11	Undo Selection	1 — 30
Hoofdmenukeuze 5:	DISPLAY	1 — 31
5.1	Toggle Discrete Map ON/OFF	1 — 31
5.2	Toggle Continuous Map ON/OFF	1 — 31
5.3	Toggle Isolines ON/OFF	1 — 31
5.4	Toggle Grid Lines ON/OFF	1 — 32
5.5	Toggle Map Overlay ON/OFF	1 — 32
5.6	Toggle Vector Plot ON/OFF	1 — 32
5.7	Toggle Pathlines ON/OFF	1 — 32
5.8	Toggle Value Display ON/OFF	1 — 32
5.9	Toggle Extremes ON/OFF	1 — 33
5.10	Toggle 1:1 Drawing ON/OFF	1 — 33
Hoofdmenukeuze 6:	PRINT	1 — 34
6.1	HALO Picture File	1 — 34
6.2	Send Image to Printer	1 — 34
Hoofdmenukeuze 7:	SPECIAL	1 — 35
7.1	Data Overview for Cell	1 — 35
7.2	Display Generic Data	1 — 35
7.3	Data from Oblique Overlay	1 — 36
7.4	Areal Water Balance	1 — 36
7.5	Convergence History	1 — 36
7.6	Calibration	1 — 36
7.7	Compare	1 — 37
7.8	Change Array Boundaries	1 — 37
7.9	Surface Water Module	1 — 37
7.10	Time Series Statistics	1 — 39
7.11	Polder Level Module	1 — 40

Bijlagen:

Bijlage I	Structuur van dataconfiguratiebestanden MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR	1 — 42
Bijlage II	Blokspecificatie van generieke geohydrologische data	1 — 45
Bijlage III	Configuratie van MODGRID	1 — 52
Bijlage IV	Formaat van bestanden voor de COMPARE module in MODGRID .	1 — 57
Bijlage V	Default waarden voor de MODFLOW sturingsparameters	1 — 60
Bijlage VI	Interpolatieprocedure bij verfijning van het rooster	1 — 61
Bijlage VII	Structuur en formaat van kaartbestanden (.XY, .XZ, .YZ)	1 — 63

DEEL 1 Programmabeschrijving voor de dataprocessor MODGRID

Wat is MODGRID en waartoe dient het?

MODGRID is een computerprogramma ter ondersteuning van de ingewikkelde taak van het modelleren van grondwaterstroming met numerieke modellen. In het bijzonder is het geschikt voor numerieke modellen gebaseerd op de eindige differentiemethode. Het is een instrument voor het opzetten, bewerken en calibreren van dergelijke modellen, waarbij interactiviteit, visuele presentatie en analyse een centrale rol spelen.

Bij vrijwel alle fasen van grondwatermodellering kan MODGRID zinvol gebruikt worden:

- 1 afleiden van de ruimtelijke discretisatie van het te modelleren onderzoeksgebied
- 2 vertaling van beschikbare (veld-)gegevens in termen van modelparameters
- 3 presentatie en analyse van invoergegevens en berekeningsresultaten
- 4 aanpassing van parameterwaardes ter calibratie of voor het simuleren van alternatieve beheersmaatregelen
- 5 produktie van een discreet, massabehoudend stromingsveld te gebruiken voor massatransport-simulaties gebaseerd op de eindige volume-methode
- 6 afleiden van modelschematisaties voor gedetailleerde, lokale modellen uit globale, regionale modellen

MODGRID is ontwikkeld om invoer voor modellen van stationaire situaties te genereren, bewerken en presenteren. Behalve enkele (ad-hoc ontwikkelde) opties om tijdreeksen van MODFLOW resultaten te analyseren, zijn er geen specifieke modules om niet-stationaire data te verwerken.

1 Afleiden van ruimtelijke discretisatie van het te modelleren onderzoeksgebied

Criteria voor het ontwerpen van de ruimtelijke discretisatie

Er zijn 4 belangrijke criteria, die de discretisatie bepalen, te weten:

- A Mathematische criteria, met name de nauwkeurigheid van de benaderende oplossing voor de potentiaalverdeling. Een vuistregel hierbij is, dat de afmetingen van de eindige differentie-cellen zo klein mogelijk moeten zijn, en dat de onderlinge variatie in afmetingen zo beperkt mogelijk moet zijn. Enerzijds is de benaderende oplossing van de potentiaalverdeling dan optimaal, en anderzijds is de onnauwkeurigheid overal van dezelfde orde grootte. Sterke overgangen in stapgrootte verlagen de nauwkeurigheid verder.
- B Hydrologische criteria. Daar waar sterke gradiënten voorkomen in randvoorwaarden en/of parameters, is ook sterke variatie in de potentiaal te verwachten. Op die plaatsen is dus een kleinere afmeting van de differentiecellen te verkiezen. Omgekeerd kan in delen van het te modelleren gebied waar weinig variatie in randvoorwaarde of parameters optreedt met grotere stappen volstaan worden. Een complicatie treedt op, wanneer de gradiënten zich in de tijd verplaatsen. Bij gebruik van een vast netwerk (zoals bij gebruik van MODGRID) is er dan geen betere keuze dan een zo groot mogelijk aantal cellen van uniforme afmeting te kiezen.

- C Beleidsmatige criteria. Hoewel moeilijk af te wegen zijn deze van groot belang. Het is namelijk van belang de nauwkeurigheid van de benaderende oplossing in overeenstemming te houden met het relatieve belang van het grondwateraspect binnen het op te lossen vraagstuk.
- D Economische criteria. Naast nauwkeurigheid speelt ook betrouwbaarheid van de modelresultaten een belangrijke rol. Ook dit is een kwestie van 'expert judgement', en dus subjectief. Toch is het van belang zo min mogelijk discrepantie te laten bestaan tussen de betrouwbaarheid van de modelparameters en de nauwkeurigheid van de oplossing. Een ander economisch criterium is, dat voor het oplossen van een (beleids-)vraagstuk een beperkt budget beschikbaar is in tijd en geld. De beschikbare middelen worden evenredig met het belang verdeeld worden over alle betrokken aspecten. Daarmee zijn beperkingen gegeven in termen van computercapaciteit en personele inzet.

Voor wat betreft punten A en B biedt MODGRID de mogelijkheid om het ontwerp van de ruimtelijke discretisatie te ondersteunen. MODGRID biedt niet de mogelijkheid om de afwegingen genoemd onder C en D te maken. In dit verband is wel op te merken dat gebruik van MODGRID de efficiëntie van het modellerwerk sterk kan verhogen. Bij een gegeven hoeveelheid tijd kan dus een optimale hoeveelheid informatie uit het modellerwerk gehaald worden.

Begrenzings van het modelgebied

Het kiezen van de begrenzingen van het te modelleren gebied is een ingewikkelde taak, waarbij geohydrologische deskundigheid een grote rol speelt. Ook het kader van de vraagstelling kan bepaalde eisen opleggen. Om redenen van fysische aard zou het te modelleren gebied idealiter onafhankelijk van zijn omgeving moeten zijn. Voordat een model met MODGRID opgezet kan worden, moeten de begrenzingen bepaald worden, uitgedrukt in minimale kaartcoördinaten in drie dimensies (ofwel de locatie van de modeloorsprong) en de corresponderende modelafmetingen. Let daarbij op, dat de verticale coördinaat (de Z-coördinaat) toeneemt met de hoogte!

Overlay van topografische kaart

MODGRID is visueel georiënteerd, en daarom wordt aanbevolen een digitaal kaartje van het te modelleren gebied te produceren. Het formaat van het bestand is omschreven in bijlage VII. In dit kaartje kunnen bijvoorbeeld waterlopen worden opgenomen, en relevante plaatsaanduidingen. Ook voor verticale dwarsdoorsneden kunnen overlays toegevoegd worden, waarin bijvoorbeeld geologische profielen zijn aangeduid.

Basisstapgrootte

Het vanuit het oogpunt van wenselijke principes van uniforme afmetingen van de differentiecellen komt tot uitdrukking in de eerste fase van het gridontwerp. Voor de drie coördinaatrichtingen (X, Y en Z) moet een zogenaamde basisstapgrootte worden opgegeven. Dit garandeert een basis-nauwkeurigheid van de resultaten van de modelberekening. Een handige keuze van modeloorsprong en basisstapgrootte maakt de relatie tussen kaartcoördinaten en modelcoördinaten zeer eenvoudig, hetgeen een groot voordeel is bij de interpretatie van resultaten.

Verfijning van het rooster

Nadat de voorgaande gegevens ingevoerd zijn, kan het grid lokaal verfijnd worden. Dit houdt in, dat rijen, kolommen of lagen onderverdeeld kunnen worden. De onderverdeling kan in 2, 3, 4 of 5 gelijke delen uitgevoerd worden. Daarmee wordt enerzijds voorkomen, dat al te grote sprongen in stapgrootte voorkomen, en anderzijds blijft de relatie tussen modelcoördinaten en kaartcoördinaten overzichtelijk.

Soms is het gewenst het rooster verder te verfijnen nadat de modelparameters al bepaald zijn en misschien ook al berekeningen zijn uitgevoerd, bijvoorbeeld als de calibratie problemen oplevert. Wat betreft de modelparameters biedt MODGRID dan 2 mogelijkheden:

- 1- Alle modelparameters worden opnieuw afgeleid uit de ruwe gegevens. Dit moet door de gebruiker expliciet worden aangegeven.
- 2- De modelparameters voor de nieuwe cellen worden bepaald door interpolatie tussen de bestaande waarden. Dit gebeurt automatisch bij het aanmaken van een nieuw gedetailleerd model uit een bestaand model.

Nota Bene *De interpolatieprocedure kan in sommige gevallen de verdeling afvlakken wanneer kolommen, rijen en/of lagen worden onderverdeeld in een even aantal kleinere kolommen, rijen en/of lagen. Zie voor een uitgebreide omschrijving van de interpolatieprocedure bijlage VI.*

MODGRID maakt het mogelijk niet alleen de begrenzingen van gebieden tegelijk met de roosterlijnen te zien, maar ook de ruimtelijke verdeling van oorspronkelijke (z.g. generieke) parameterwaarden in gekleurde contourenkaartjes. Alle gradiënten in de oorspronkelijke gegevens zijn dus herkenbaar. Dit vergemakkelijkt het optimaal verfijnen van het rooster ter plaatse van gradiënten in randvoorwaarden en geohydrologische eigenschappen.

2 Vertaling van beschikbare (veld-)gegevens in termen van modelparameters

Om een berekening van de grondwaterstroming te kunnen maken met een numeriek grondwatermodel zoals MODFLOW moeten voor alle cellen van het ontworpen rekenrooster geohydrologische eigenschappen en randvoorwaarden bepaald worden. Hiervoor zijn twee primaire informatiebronnen van belang, te weten veldwaarnemingen en schattingen.

De vertaling van waarnemingen en/of schattingen naar modelparameters verloopt in het algemeen in 2 stappen:

- 1 Vertaling van puntwaarnemingen naar vlakvullende of ruimtevullende beschrijvingen van het verloop van een parameter. Hierbij wordt een interpolatietechniek gebruikt.
- 2 Bepaling van een gemiddelde waarde voor de parameter door middeling over het oppervlak of volume.

Veldwaarnemingen van ruimtelijk variabele grootheden (zoals alle geohydrologische eigenschappen van de ondergrond) worden vaak opgeslagen in een geografisch informatiesysteem of GIS.

Vector-GIS informatie

Voor een vector-georiënteerd GIS is de ruimtelijke verdeling van een parameter gegeven als een vlakvullende verzameling veelhoeken, waarbinnen de parameterwaarde constant is. Op deze manier kan bijvoorbeeld het oppervlaktewaterpeil voor peilbeheerste gebieden met een constant peil per afwateringseenheid beschreven worden. Een ander voorbeeld is de beschrijving van neerslagintensiteit met behulp van een netwerk van Thiessen-polygonen.

Per modeldoorsnede kan MODGRID de ruimtelijke verdeling beschreven als een zogenaamde polygonen-coverage automatisch verwerken tot parameterwaarden per roostercel. Daartoe wordt per cel eerst de overlap van de polygonen met de cel bepaald, waarna een naar oppervlakte gewogen gemiddelde waarde bepaald wordt.

Raster-GIS informatie (SURFER)

Voor continu verlopende grootheden is een andere benadering gewenst, omdat de samenhang tussen de gemiddelde waarde voor een roostercel en de beschikbare waarnemingspunten minder simpel is. Om een (quasi-) continue verdeling te genereren moet een interpolatietechniek gebruikt worden die voor een regelmatig rooster waarden bepaalt. Door de roosterafmetingen voldoende klein te kiezen kan een continue verdeling benaderd worden. De interpolatie kan uitgevoerd worden met een raster-georiënteerd GIS of bijvoorbeeld met het programma SURFER. MODGRID kan voor een modeldoorsnede de parameterverdeling afleiden uit een interpolatie met SURFER. Daartoe wordt weer de overlap bepaald tussen de interpolatiecellen en de roostercellen, waarna een naar oppervlakte gewogen gemiddelde waarde berekend wordt voor de roostercellen. Wanneer de roosterafstand in SURFER niet groter is dan de kleinste celafmeting in de modeldoorsnede treedt er geen verlies van nauwkeurigheid op. Voor geavanceerde interpolatie-technieken is er een risico, dat de interpolatieresultaten geen fysische betekenis meer hebben, zoals bijvoorbeeld een negatieve dikte of doorlaatvermogen van een laag.

Thiessen-interpolatie

MODGRID kent daarom een eigen vlakvullende interpolatiemethode, gebaseerd op triangulatie van Thiessen-polygonen. Binnen de driehoeken van dit netwerk wordt het verloop beschreven door middel van lineaire basisfuncties. Deze methode levert een continue verdeling in het vlak op, waarbij geïnterpoleerde waarden nooit groter dan de grootste of kleiner dan de kleinste waargenomen waarde zijn.

Waterlopen-informatie

MODGRID beschikt over (een prototype van) een methodiek om informatie over waterlopen interactief vast te leggen. Daarbij kan met de muis een waterloop in trajecten worden gespecificeerd. Per traject kan de breedte worden vastgesteld, en als deze vastligt kunnen de hydrologische parameters voor het traject worden opgegeven:

- bodemhoogte
- waterniveau; en
- infiltratieweerstand.

Bij het aanmaken van MODFLOW invoerbestanden wordt op basis van de opgeslagen generieke informatie de rivierinformatie per cel van het MODFLOW-rooster uit een overlay berekend en weggeschreven naar een invoerbestand voor de RIVER module van MODFLOW. De parameters kunnen interactief worden gewijzigd.

Nota Bene Het wordt overwogen MODGRID uit te breiden met een module om voor bestaande schematisaties de schematisatie interactief te wijzigen. Een andere mogelijkheid is de koppeling van MODGRID aan een hydraulisch oppervlaktewatermodel zoals DUFLOW. Deze optie is met name bruikbaar bij het definiëren van beheersvarianten die wijzigingen van oppervlaktewaterpeilen betreffen. Dit is vooral van belang voor dynamische simulaties; MODGRID is thans echter nog niet toegerust met modules om tijdreeksen van invoergegevens te verwerken.

Niet-interpoleerbare puntgegevens

Sommige gegevens kunnen of mogen niet geïnterpoleerd worden, zoals bijvoorbeeld puntonttrekkingen (vandaar de benaming in MODGRID: Well type data). Eenmaal in het vereiste formaat gebracht kunnen dergelijke gegevens met MODGRID automatisch worden toegewezen aan de corresponderende roostercel(len). Bij onderverdeling of bij het afleiden van detailmodellen vindt automatisch zodanige verdeling plaats, dat het totale debiet gelijk blijft.

Alternatieve initialisatiewaarden

Voor het geval er geen of onvoldoende waarnemingen voorhanden zijn kent MODGRID alternatieve manieren om parameterwaarden toe te kennen:

1 Defaults

Om te voorkomen dat bepaalde eigenschappen voor cellen niet gedefinieerd zijn wordt initieel aan alle cellen een default waarde toegekend. De defaultwaarden zijn per parameter gespecificeerd worden door de gebruiker in de configuratiebestanden MODGRID.DAT en MODFLOW.PAR. Desgewenst kan de gebruiker dit bestand aanpassen aan de eigen voorkeur en ervaring.

2 Constanten

Een (van de default afwijkende) constante parameterwaarde kan worden toegekend aan een blokvormig deel van het modelrooster.

3 Lineaire interpolatie

Als voor een blokvormig gebied een parameterwaarde is gegeven voor ieder hoekpunt kan MODGRID een lineair geïnterpoleerde waarde toekennen aan de cellen die binnen het blokvormige gebied vallen.

Zie bijlage I voor het vereiste formaat bij specificatie van generieke gegevens voor gebruik in MODGRID.

Bestaande MODFLOW schematisaties

MODGRID biedt nog een mogelijkheid voor het toekennen van parameterwaarden aan de roostercellen, namelijk door gebruik te maken van een bestaande set MODFLOW invoerbestanden. Op zich is het niet nodig om MODGRID te gebruiken als men al over een set MODFLOW invoer beschikt. Als men echter parameterwaarden wil wijzigen, of het modelrooster verfijnen zonder alle invoer opnieuw met de hand aan te hoeven maken, dan kan dit toch een handige oplossing zijn. De huidige versie van MODGRID kan invoer verwerken voor de volgende MODFLOW modules:

- Basismodule (bestand met de extensie .BAS)
- Block Centered Flow (bestand met de extensie .BCF)
- Recharge (bestand met de extensie .REI)

Voor rivierinformatie heeft MODGRID een eigen verwerkingsvorm, waarvoor de corresponderende MODFLOW invoer niet automatisch als gegevensbron gebruikt kan worden. Voor met MODGRID gedefinieerde rivieren kan echter wel het vereiste MODFLOW invoerbestand aangemaakt worden (bestand met de extensie .REI). Zie hiervoor ook:

- het voorgaande kopje over waterlopen-informatie;
- paragraaf 6 van deze programmabeschrijving (Gebruik van MODGRID voor de simulatie van beheersmaatregelen); en
- onderdeel 7.9 van de MODGRID menubeschrijving (Hoofdmenu-item 7: SPECIAL, submenu-item 9: Surface Water Module).

Nota Bene Bij het importeren van bestaande MODFLOW schematisaties hanteert MODGRID impliciet de naamgeving volgens de conventie die bij de WL-versie van MODFLOW van toepassing is. In sommige gevallen is de structuur van de genoemde bestanden minder vrij dan toegestaan in standaard MODFLOW. In het bijzonder is dit het geval voor freatische schematisaties. Voordat de USGS (de makers van MODFLOW) met de BCF2 module kwamen, heeft WL reeds een uitbreiding aan MODFLOW verricht die het re-activeren van drooggevallen cellen mogelijk maakt, evenals het uitrekenen van kweloppervlakken. Neem contact op met WL als u freatische schematisaties wilt inlezen.

Overigens is het inlezen van bestaande schematisaties alleen handig als er geen grote wijzigingen meer voorzien worden in het model. In andere gevallen is het waarschijnlijk efficiënter om op basis van generieke gegevens het model opnieuw op te zetten met MODGRID. Daarmee planten fouten ten gevolge van de discretisatie zich niet voort bij verfijning van het rooster.

3 Presentatie en analyse van invoergegevens en berekeningsresultaten

Het meest karakteristieke element van MODGRID is de visuele benadering van de presentatie, waarbij zoveel mogelijk gebruik gemaakt wordt van de grafische capaciteiten van de computer. Terwille van de eenvoud is de loodrechte dwarsdoorsnede als uitgangspunt gekozen bij de presentatie.

Oriëntatie, roostercursor en keuze van het aangezichtsvlak

Als oriëntatiepunt is een roostercursor zichtbaar. In een statusbalk wordt de positie van deze cursor aangegeven in roostercoördinaten en in wereldcoördinaten. Met de cursortoetsen of door de muis te bewegen kan de cursor verplaatst worden. Bovendien zijn er enkele hulptoetsen gedefinieerd om snel de randen en de hoeken van de getoonde dwarsdoorsnede te kunnen bereiken met de roostercursor. Onderstaande tabel geeft een overzicht van deze bijzondere toetsen of combinaties.

Toets	Effect op roostercursor
Pijl rechts	Een cel naar rechts (indien niet al aan de rechterrاند)
Pijl links	Een cel naar links (indien niet al aan de linkerrاند)
Pijl omhoog	Een cel naar boven (indien niet al aan de bovenrand)
Pijl omlaag	Een cel naar onder (indien niet al aan de onderrاند)
[Ctrl] + Page Up	Naar de rechterbovenhoek in de huidige dwarsdoorsnede
[Ctrl] + Page Down	Naar de rechterbenedenhoek in de huidige dwarsdoorsnede
[Ctrl] + Home	Naar de linkerbovenhoek in de huidige dwarsdoorsnede
[Ctrl] + End	Naar de linkerbenedenhoek in de huidige dwarsdoorsnede
[Alt] + Pijl rechts*	Naar de rechterrاند in de huidige rij
[Alt] + Pijl links*	Naar de linkerrاند in de huidige rij
[Alt] + Pijl omhoog*	Naar de bovenrand in de huidige kolom
[Alt] + Pijl omlaag*	Naar de onderrاند in de huidige kolom

* Bij combinaties van cursortoetsen met de [Alt] toets moeten de cursortoetsen op het numerieke deel van het toetsenbord (rechts) gebruikt worden.

Om een andere doorsnede door het modelgebied getoond te krijgen volstaat een menukeuze. De nieuwe getoonde dwarsdoorsnede heeft de gevraagde richting en bevat de cel waarin de roostercursor zich bevindt. Met het toetsenbord kan de roostercursor op een alternatieve manier verplaatst worden loodrecht op de getoonde dwarsdoorsnede. Hiervoor zijn de volgende toetscombinaties gedefinieerd:

Toets	Effect op roostercursor
[Ctrl] + Pijl rechts	Een vlak verder loodrecht op de huidige dwarsdoorsnede (indien niet al in de laatste doorsnede)
[Ctrl] + Pijl links	Een vlak terug loodrecht op de huidige dwarsdoorsnede (indien niet al in de eerste dwarsdoorsnede)

Omdat de schermresolutie nauwkeurige bestudering van het rooster kan bemoeilijken biedt MODGRID een zoommogelijkheid. Herhaal inzoomen is mogelijk tot op het niveau van één enkele cel.

Onderdelen van de schermopbouw

Een scherm bestaat uit een of meer van de volgende onderdelen:

- De titelregel, die overeenkomt met de eerste regel waarmee het rekengeval omschreven is bij het openen. Bij het importeren van bestaande MODFLOW invoer komt de titelregel overeen met de eerste regel uit het bestand met Basic Data (.BAS extensie).
- Een wereldcoördinatenbalk, waarin de wereldcoördinaten zijn aangegeven van het hart van de cel waarin de roostercursor zich bevindt
- De statusbalk, die de toestand van het programma aangeeft en/of de coördinaten van de roostercursor en een aanduiding van de huidige dwarsdoorsnede. De initiële toestand van het programma is Cursor Navigation. Na het openen van een rekengeval (New Case) komt MODGRID in deze toestand, hetgeen te zien is aan de aanduiding:

Mode: Cursor Navigation IX: 1 IY: 1 IZ: 1 XY

- Een menubalk met 7 hoofdmenu-elementen;
- Een submenu-venster met een variabel aantal submenu-elementen;
- Een kaderlijn, waarlangs links- en rechtsonder en linksonder en -boven de begrenzingen van het huidige (deel van het) model zijn aangegeven in wereldcoördinaten. Binnen deze kaderlijn kunnen verschillende gegevens getoond worden die betrekking hebben op de huidige dwarsdoorsnede. Dit zijn:
 - Een kruisvormige roostercursor;
 - Een netwerk van roosterlijnen;
 - Een topografische kaart;
 - Een kaart van gevulde continue contouren;
 - Een kaart van gevulde discrete contouren;
 - Isolijnen;
 - Kruisjes ter aanduiding van geselecteerde cellen; en
 - Hulplijnen of rechthoeken die het selecteren van cellen eenvoudig maken
 Naar keuze kan gebruik gemaakt worden van een proportioneel juiste weergave van het modelgebied, of van een getransformeerde weergave, waarbij de doorsnede tot maximale vlakvulling wordt uitgerekt.
- Een verzameling vectorpijlen, die richting en grootte van de stroming in het huidige vlak weergeeft.
- Een legenda, bestaande uit 2 elementen:
 - Een regel tussen de titelregel en de bovenrand van het kader met de naam en eenheid van de huidige parameter.
 - Een schaal bestaande uit gekleurde balken, waarin een aanduiding van de kleurcode voor het betreffende interval voor de waarde van de huidige parameter.
- Een aanduiding van de extreme waarden van de verdeling. Boven de kleurschaal zijn daarin aangegeven:
 - de globale extreme waarden en hun roostercoördinaten
 - idem voor de getoonde dwarsdoorsnede.
 Dit hulpmiddel vereenvoudigt het analyseren van 3-dimensionale datamatrices zeer.
- Een tweede statusbalk beneden de eerste, waarin een aanduiding wordt gegeven van de thans door MODGRID verlangde invoer (de PROMPT). Deze balk wordt ook gebruikt voor de aanduiding van de exacte parameterwaarde voor de cel waarin de roostercursor zich bevindt.

Weergave van de verdeling van waarden in de getoonde dwarsdoorsnede

In principe bestaan de volgende manieren om parameterwaarden en berekeningsresultaten voor roostercellen weer te geven:

- 1 Een discrete vlakvullende verdeling, waarbij gebruik gemaakt wordt van een kleurcode. Het rechthoekige deel van de getoonde doorsnede dat correspondeert met een eindige differentiecel wordt ingekleurd volgens een kleurschaal.
- 2 Een continue vlakvullende verdeling, waarbij gebruik gemaakt wordt van een kleurcode. De waarde voor een eindige differentiecel wordt verondersteld te gelden voor het zwaartepunt van de cel. Dit levert een beperkt aantal punten op, waartussen bilineair geïnterpoleerd wordt op pixelbasis. De kleur van een pixel wordt weer bepaald door de ligging van de geïnterpoleerde waarde op de kleurschaal.
- 3 Een isolijnenverdeling. Hierbij worden 1 of meer isolijnen getoond met regelmatige intervalafstanden. Begin- en eindwaarde van de schaal en het aantal intervallen is vrij te kiezen. Een kleurcode geeft het niveau van de contouren aan. Het interpolatie-algoritme is gebaseerd op een versprongen rooster, waarbij de roosterlijnen niet tussen de zwaartepunten van de cellen lopen, maar er precies mee samenvallen. Daarmee is een rooster gedefinieerd waarin per rechthoek vier waarden gegeven zijn op de hoekpunten. Een contour wordt binnen een rechthoek getraceerd door het verloop van de waarde te beschrijven met zogenaamde lineaire basisfuncties.
Voor weergave van de berekende waarden met de TOPO module van het interpolatiepakket SURFER (een produkt van Golden Ten software, Inc.) kan het benodigde gridbestand automatisch met MODGRID aangemaakt worden. De gridafstanden in de 2 coördinaatrichtingen en het vlak waarvoor de uitvoer gemaakt moet worden kunnen vrij gekozen worden.
- 4 De precieze waarde voor individuele cellen kan getoond worden door het activeren van de betreffende switch in het DISPLAY menu. Hierdoor wordt in een aparte statusbalk onderaan het scherm de parameterwaarde aangegeven voor de cel waarin de roostercursor zich bevindt.
- 5 Voor een gedetailleerd overzicht van de invoer- en uitvoervariabelen voor een cel en zijn zes burens is een speciaal scherm beschikbaar. Lokale gradiënten kunnen hiermee gemakkelijk bestudeerd worden, en bovendien kan de waterbalans voor de betreffende individuele cel geanalyseerd worden.

Nota Bene Zoals vermeld bij de paragraaf over gridontwerp kan de verdeling van beschikbare generieke gegevens ook zichtbaar gemaakt worden.

Ook uitvoergegevens kunnen met MODGRID gevisualiseerd worden. Daartoe moeten de uitvoergegevens in een Output Data Matrix formaat beschikbaar zijn. Een manier om dit te bereiken is het gebruiken van de WL-versie van MODFLOW, die een aangepaste uitvoerroutine omvat, waarmee automatisch een .ODM bestand wordt gegenereerd. Een alternatief is om een conversieslag uit te voeren met behulp van een programma dat de standaard MODFLOW-uitvoer omzet in ODM-formaat. Een dergelijk programma is thans nog niet beschikbaar, maar kan op verzoek geproduceerd worden.

- 6 Voor wat betreft de modelresultaten is er een extra presentatievorm. De berekende stroming is namelijk beschikbaar in zogenaamde scalaire vorm, dat wil zeggen dat de grootte X-, Y- en Z-componenten van de stroming als volumestroom gegeven is. Omdat de richting van de stroming en de grootte van de stroomsnelheid ook van belang kan zijn bij de interpretatie van de resultaten, is er presentatie van snelheidsvectoren mogelijk. Daarbij wordt informatie gebruikt over dikte en porositeit van het gemodelleerde systeem, die is opgeslagen in het Input Data Matrix bestand (.IDM).

Veranderen van de intervalgrenzen voor de kleurschaal

De intervalschalen voor alle invoerparameters en uitvoerresultaten worden bij aanroep van het programma ingelezen uit de configuratiebestanden MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR. Deze bestanden bestaan uit 2 groepen van 16 records. Het eerste record van beide groepen dient voor commentaar ter verduidelijking.

In de eerste groep records volgt daarna voor de achtereenvolgende parameters een record met de volgende gegevens:

- | | | |
|---|-----|--|
| 1 | A20 | Omschrijving in woorden van de parameter (de parameternaam). |
| 2 | A10 | Omschrijving in woorden van de parametereenheid. |
| 3 | A1 | De opslagwijze van de parameter, deze kan zijn N (van Natuurlijk) of L (van Logaritmisch). |
| 4 | A4 | De extensie waaraan een bestand met generieke gegevens voor de parameter te herkennen is. |
| 5 | F10 | De defaultwaarde voor de parameter. |
| 6 | F10 | De maximaal toelaatbare waarde voor deze parameter. |
| 7 | F10 | De minimaal toelaatbare waarde voor deze parameter. |

In de tweede groep records volgt na het commentaar-record ook weer per parameter een record met de volgende getallen:

- | | | |
|-------|-----|--|
| 1 | I2 | Aantal intervalgrenzen in legenda (maximaal 10) |
| 2e.v. | F10 | De numerieke waarden voor de intervalgrenzen. Deze moeten oplopend zijn en mogen niet buiten de extreme waarden vallen die voor de parameter in groep 1 gespecificeerd zijn. |

MODGRID biedt de mogelijkheid om per parameter de intervalgrenzen interactief te wijzigen. Om de defaultwaarden van de intervalgrenzen te wijzigen moet het programma verlaten worden, waarna met een editor de gewenste wijzigingen aangebracht moeten worden in het betreffende configuratiebestand MODGRID.PAR of een door de gebruiker gemaakte modelspecifieke variant hiervan.

4 Aanpassing van parameterwaarden

Een veel voorkomende handeling bij modellering is het uitvoeren van rekenkundige bewerkingen op de waarden van een of meer parameters voor een verzameling roostercellen. Dit kan nodig zijn bij het opzetten en kalibreren van een model of bij het definiëren van varianten ter simulatie van een beheersmaatregel. In MODGRID wordt steeds de volgende principes gehanteerd bij het uitvoeren van bewerkingen:

- er kan slechts één datamatrix tegelijk bewerkt worden;
- de bewerking wordt gedefinieerd aan de hand van 3 gegevens:
 - 1 een geselecteerde verzameling cellen;
 - 2 een te bewerken parameter;
 - 3 een bewerking uit te voeren op de waarden van de geselecteerde parameter voor de geselecteerde verzameling cellen. De mogelijke bewerkingen zijn de volgende:
 - A optellen van een vaste waarde
 - B vermenigvuldigen met een vaste waarde
 - C vervangen door een vaste waarde
 - D berekenen als combinatie van 2 andere parameters

Hoe kunnen cellen geselecteerd worden?

Het selecteren van cellen kan met MODGRID op verschillende manieren:

Selectie van individuele cellen

Hierbij kan de roostercursor vrijelijk door het model bewogen worden met de muis en/of cursortoetsen. Om een cel te selecteren volstaat de [Enter]-toets of de linkermuisknop. Nogmaals indrukken maakt de selectie ongedaan. Visueel wordt de selectie kenbaar gemaakt door een kruisje in de betreffende cel. Desgewenst kan de waarde voor de huidige parameter daarbij getoond worden.

Selectie van een aaneengesloten blok cellen

Bij deze selectiemethode kan vanaf een vrij te kiezen beginpunt een blokvormig deel van het rooster in een keer geselecteerd worden.

Selectie van alle (deels) binnen een polygoon gelegen cellen

Deze wijze van selecteren biedt de mogelijkheid om alle cellen binnen een willekeurige (zichzelf niet snijdende) grenslijn te selecteren. Met de muis kunnen de achtereenvolgende hoekpunten van de polygoon aangegeven worden. Na het sluiten van de polygoon worden automatisch alle cellen die (deels) binnen de polygoon vallen geselecteerd.

Selectie aan de hand van een voorwaarde

Deze methode is gebaseerd op de waarde voor de huidige parameter die aan een cel is toegewezen. Alleen die cellen worden geselecteerd, waarvoor de waarde van de actieve parameter tussen 2 vrij te kiezen grenswaarden ligt.

Selectie van de huidige dwarsdoorsnede

Deze selectiemethode maakt het mogelijk om in een keer alle cellen in de thans getoonde dwarsdoorsnede te selecteren.

Selectie van alle cellen

Voor het uitvoeren van collectieve bewerkingen kunnen hiermee alle cellen in een keer geselecteerd worden

- Nota Bene* - *Selectieprocedures respecteren de begrenzingen die met de ZOOM optie zijn ingesteld. In de uitgangssituatie vallen de zoomgrenzen samen met die van het modelrooster als geheel. Als er tussentijds wordt ingezoomd heeft dit gevolgen voor alle vormen van selectie. Om het zoomen ongedaan te maken kan uitgezoomd worden.*
- *Er zijn twee manieren om reeds geselecteerde cellen te behandelen bij een selectie. Bij de eerste (standaard) manier blijft een reeds geselecteerde cel die voor selectie in aanmerking komt geselecteerd. Bij de tweede (met XOR aangeduide) manier wordt een reeds geselecteerde cel weer 'geontselecteerd'. Dit kan handig zijn om alle cellen te selecteren die **niet** aan een bepaalde voorwaarde voldoen.*
 - *Het resultaat van een selectieprocedure kan met een eigen naam worden opgeslagen en later weer opgevraagd. Dit heeft alleen zin wanneer de verzameling cellen niet op eenvoudige wijze snel te definiëren is.*
 - *het MODGRID menu biedt de mogelijkheid om de extreme waarden binnen de geselecteerde verzameling cellen en hun roostercoördinaten te tonen.*

Hoe kunnen parameterwaarden voor de geselecteerde cellen gewijzigd worden?

De toekenning van parameterwaarden aan cellen vindt in eerste instantie plaats door het vertalen van beschikbare generieke informatie in termen van het ontworpen rooster. Op basis van het resultaat kan modelinvoer voor MODFLOW geproduceerd worden, waarmee een testberekening gedaan kan worden. Daarbij kan en zal meestal blijken, dat bepaalde modelparameters incorrecte waarden hebben voor een of meer cellen.

Als deze incorrecte waarden zijn terug te voeren op fouten in de generieke informatie, dan dient deze natuurlijk bij voorkeur gecorrigeerd te worden. Vervolgens moet ook het afleiden van de parameterwaarden herhaald worden.

Soms is er geen aanleiding om generieke informatie te wijzigen, maar is het wel nodig om de parameterwaarden te wijzigen.

Dit kan met de volgende handelingen bewerkstelligd worden:

- 1 Selecteren van het betreffende deel van het modelrooster
Hiervoor kan een van de eerder beschreven selectiemethodes gebruikt worden. (Indien de wijzigingen voor meer dan een parameter uitgevoerd gaan worden is het verstandig om de geselecteerde groep cellen op te slaan met een duidelijke naam).
- 2 Selecteren van de gewenste parameter

- 3 Selecteren van de numerieke waarde waarmee de bewerking uitgevoerd gaat worden
- 4 Selecteren van het type bewerking. Hierbij bestaat er een keuze uit:
 - optellen van de geselecteerde waarde bij de huidige waarde.
 - vermenigvuldigen van de huidige waarde met de geselecteerde waarde.
 - vervangen van de huidige waarde door de geselecteerde waarde.

Als alternatief voor de stappen 3 en 4 kan ook gekozen worden voor het construeren van parameterwaarden. Zo kan (als triviaal voorbeeld) de laagdikte voor de geselecteerde verzameling cellen gedefinieerd worden als het verschil tussen de bovenkant en de onderkant.

Nota Bene: Bewerkingen op de datamatrix zijn beperkt tot geselecteerde cellen binnen het huidige gezoomde venster.

Als de bewerking bestaat uit een constructie op basis van andere parameters, hoeft er geen waarde geselecteerd te worden.

Gebruik van MODGRID bij modelcalibratie

Een veel voorkomende handeling bij het ijken van modellen is het vergelijken van berekende waarden van potentialen met gemeten waarden. Het patroon van de afwijkingen bevat vaak veel informatie die de calibratie vergemakkelijkt. Daarom biedt MODGRID de mogelijkheid om voor een verzamelingen beschikbare metingen de afwijkingen van de corresponderende berekende waarden te presenteren in een kaartje.

Na visualisatie van de berekende resultaten (en confrontatie met de gemeten waarde via de calibratie-optie) kan met het selectie-mechanisme eenvoudig een selectie van cellen plaatsvinden waarvoor aanpassingen nodig zijn. Ook de aanpassing op zich kan eenvoudig met MODGRID uitgevoerd worden, waarna het resultaat weer visueel geïnspecteerd kan worden.

Waterbalansen voor deelgebieden

Tijdens en na calibratie van een model is het vaak van belang voor een deelgebied een waterbalans samen te stellen. Ook hierbij is visuele weergave van groot belang. MODGRID biedt de mogelijkheid om voor een geselecteerde verzameling cellen de ruimtelijke verdeling van alle componenten van de waterbalans te tonen.

Gebruik van MODGRID voor simulatie van beheersmaatregelen

Het oppervlaktewatersysteem is het belangrijkste te beïnvloeden beheersobject van de instanties die verantwoordelijk zijn voor waterbeheer. Bij vraagstukken van integraal waterbeheer waarin het grondwatersysteem een rol van belang speelt, hebben de te analyseren processen en/of maatregelen vaak betrekking op verandering van oppervlaktewaterpeilen. Deze oppervlaktewaterpeilen bepalen de wisselwerking tussen het grondwatersysteem en het oppervlaktewatersysteem. Daarbij zijn 2 soorten gebieden te onderscheiden:

- vrij afwaterende gebieden met weinig oppervlaktewater. Hier is de wisselwerking geconcentreerd in grote waterlopen. Modelmatig is deze wisselwerking in MODFLOW te vertalen in randvoorwaarden, die beschreven worden in de RIVER of STREAM module. Doorgaans is de grondwaterspiegel freatisch.

- volledig peilbeheerste gebieden met een dicht stelsel van waterlopen. Modelmatig is deze wisselwerking in MODFLOW te vertalen als een bovenrandvoorwaarde in de vorm van een vaste stijghoogte in de bovenste modellaag. Daarmee is de daarondergelegen modellaag per definitie een zogenaamde 'confined aquifer'.

Voor het simuleren van beheersmaatregelen is het dus van groot belang om de oppervlaktewaterpeilen te kunnen aanpassen. MODGRID biedt voor beide vormen van oppervlaktewatersysteem de mogelijkheid om interactief aanpassingen uit te voeren.

6 Hoe kan MODGRID gebruikt worden bij het afleiden van detailmodellen?

Geohydrologische modellering vindt vaak plaats in etappes, waarbij in eerste instantie een grootschalig model wordt ontwikkeld om het globale stromingspatroon te iken en aldus correcte randvoorwaarden af te leiden voor het eigenlijke probleemgebied. MODGRID biedt de mogelijkheid om vrijwel automatisch voor willekeurige deelgebieden een detailmodel af te leiden. Daarbij zijn 2 mogelijkheden beschikbaar:

- 1 het detailmodel valt precies samen met een rechthoekige verzameling cellen van het regionale model
- 2 het rechthoekige detailmodel is in het XY-vlak om een willekeurige hoek gerooteerd.

7 Filosofie achter verticale schematisatie

Er is zeer bewust gekozen bij de opzet van MODGRID om gegevens rond doorlatendheid, doorlaatvermogen, verticale weerstand en dergelijk in zo oorspronkelijk mogelijke vorm op te slaan. De gedachte hierachter is, dat bij boringen/metingen in het veld of bepalingen in het laboratorium meestal de dikte van bodemlagen en de doorlaatfactor (hydraulic conductivity) rechtstreeks bepaald worden. Op basis van pompproeven kunnen weliswaar samengestelde grootheden bepaald worden, zoals het horizontale doorlaatvermogen ($k_h D$) en de verticale weerstand c (het quotiënt van laagdikte D en verticale doorlaatfactor k_v) van een laag. Zeer dikwijls is er echter ook informatie beschikbaar over de opbouw van de ondergrond, inclusief de dikte en verbreiding van lagen. De grootste onzekerheid betreft dan dus de doorlaatfactoren k_h en k_v . Bij modelcalibratie zal dus bij voorkeur aan deze 'knop' gedraaid worden, terwijl de dikte-informatie gehandhaafd blijft.

Een tweede belangrijke reden is, dat een grondwaterstromingsberekening vaak dient voor de bepaling van het stromingsveld voor transportmodellering. Voor een dergelijk berekening is er hoe dan ook informatie benodigd over laagdiktes. Deze informatie kan dan net zo goed meteen gebruikt worden bij de geohydrologische modellering, zodat consistentie tussen de modelschematisaties gewaarborgd is.

In veel gevallen worden grondwaterstromingsprocessen die zich in werkelijkheid altijd in de 3-dimensionale ruimte afspelen voor het modelleren gereduceerd tot een quasi 2-dimensionaal systeem. In de verticaal worden watervoerende lagen onderscheiden, waarin geen variatie van toestandsvariabelen of geohydrologische parameters in de verticaal optreedt. Relatief slechtdoorlatende lagen die als scheiding optreden tussen 2 aangrenzende watervoerende lagen worden geschematiseerd tot een verticale weerstand die bepalend is voor de verticale uitwisseling van water tussen de aangrenzende watervoerende lagen.

MODGRID is gebaseerd op het uitgangspunt dat een 3-dimensionaal proces in principe ook in 3 dimensies gemodelleerd moet worden. Dit heeft de volgende voordelen:

- het is niet nodig om vereenvoudigende aannamen te doen over de stroomrichting in watervoerende pakketten en slechtdoorlatende lagen;
- bij modellering van massatransport kan een eindige volume-schematisatie van het probleemgebied zonder veel moeite afgeleid worden uit het model.

Een nadeel van deze keuze is, dat bij sterke gradiënten in geohydrologische eigenschappen de iteratieve berekening van het potentiaalveld moeizamer verloopt.

Een andere consequentie is, dat een set MODFLOW invoerbestanden corresponderende minder informatie bevat dan het corresponderende MODGRID Input Data Matrix bestand (.IDM bestand) met parameterwaarden voor een modelrooster. Dit betreft de verticale doorlatendheid per modellaag. In het voor MODFLOW gehanteerd modelconcept is de verticale stroming van water tussen twee aangrenzende eindige differentie-cellen evenredig met het produkt van het potentiaalverschil en de zogenaamde leakance. Deze leakance is de reciproke waarde van de vertikale weerstand. Deze vertikale weerstand is een eigenschap van 2 lagen: de waarde wordt bepaald door dikte D en vertikale doorlaatfactor k_v van beide aangrenzende lagen. De bijdrage van de onderste laag bedraagt:

$$C_{(onder)} = \frac{D_{(onder)}}{K_{v(onder)}}$$

en van de bovenste laag:

$$C_{(boven)} = \frac{D_{(boven)}}{K_{v(boven)}}$$

De totale weerstand c_{totaal} is gelijk aan de som van c_{onder} en c_{boven} . De daaruit volgende leakance is gelijk aan

$$Leakance_{(totaal)} = \frac{K_{v(onder)} * K_{v(boven)}}{(K_{v(onder)})(D_{(onder)}) * (K_{v(boven)})(D_{(onder)})}$$

In het MODFLOW invoerbestand met Block Centered Flow informatie (.BCF bestand) is per roostercel in iedere modellaag alleen de waarde van $Leak_{\text{totaal}}$ gegeven. Hieruit kunnen de waarden voor k_v en D voor de afzonderlijke lagen niet eenduidig afgeleid worden.

DEEL 2 Menubeschrijving voor de dataprocessor MODGRID

De menustructuur geeft op het hoogste niveau 7 keuzemogelijkheden:

- 1- FILES;
- 2- GRID;
- 3- DATA;
- 4- SELECT;
- 5- DISPLAY;
- 6- PRINT; en
- 7- SPECIAL

In de navolgende paragrafen zullen deze hoofdmenukeuzen met de bijbehorende submenukeuzen achtereenvolgens behandeld worden.

Het hoofdmenu kan alleen geactiveerd worden vanuit de Cursor Navigation Mode. Dit kan gedaan worden door het indrukken van [F1] of de linkermuisknop.

De toestand (of Mode) waarin het programma verkeert wordt aangegeven in de statusbalk onder aan het scherm.

Een algemene opmerking bij de bediening van MODGRID via de menustructuur is, dat de volgende conventie zoveel mogelijk wordt gehandhaafd:

- De [Enter]-toets en de linkermuisknop hebben beide dezelfde betekenis van bevestiging van een keuze of van de laatste door de gebruiker ingevoerde informatie
- De [Escape]-toets en de rechtermuisknop hebben beide dezelfde betekenis van annuleren van de laatst gemaakte keuze of van de laatste door de gebruiker ingevoerde informatie.
- Waar mogelijk is deze informatie nog opgenomen in de invoerprompt, waarmee om een actie van de gebruiker wordt gevraagd.

Waar in dit document de files MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR worden genoemd, kan, indien bestaand, worden gelezen de files <CASENAME>.PAR en <CASENAME>.VAR. Deze files hebben bij het lezen door MODGRID namelijk voorrang.

Hoofdmenukeuze 1: FILES

Keuze van deze optie activeert een submenu van 12 mogelijkheden, gerelateerd aan het exporteren en/of importeren van data van/naar schijf.

De keuzes zijn:

- 1 New Case ...
- 2 Import MODFLOW Input Set
- 3 Import Generic Data Set
- 4 Subset Output (Parallel)
- 5 Subset Output (Oblique)
- 6 Generate MODFLOW Input
- 7 Vector GIS output
- 8 SURFER Grid File Output
- 9 STYXZ Format Output
- 10 STYXZ Water Balance Files
- 11 MODPATH Input Files
- 12 Quit MODGRID ...

1.1 New Case ...

Deze keuze roept een nieuwe, al dan niet bestaande, schematisatie aan. Hiertoe moeten worden ingevoerd:

- de bestandsnaam gerelateerd aan de schematisatie. Deze moet voldoen aan de DOS-conventie en mag bovendien niet langer dan 40 karakters zijn.

Wanneer het een nog niet bestaande case betreft moet tevens worden ingevoerd:

- de maximaal mogelijk/nodige aantallen cellen van het rooster in de X, Y en Z-richtingen.
- een omschrijving in woorden van het probleem. Hiervoor zijn 2 regels tekst van 80 karakters beschikbaar.
- de ligging van de modeloorsprong.
- de modelafmetingen.
- de basisstapgrootte (afstand tussen roosterlijnen).

Deze laatste 3 gegevens moeten steeds voor de X, Y en Z-richting opgegeven worden.

1.2 Import MODFLOW Input Set

Deze menukeuze is bedoeld voor het omzetten van een MODFLOW-bestanden set in MODGRID-formaat, waarvoor achtereenvolgens moet worden ingevoerd:

- de naam van het nieuwe MODGRID bestand.
- de naam van de bestaande MODFLOW set.

Nota Bene De oriëntatie binnen een model volgens de definitie van MODFLOW wijkt af van de in MODGRID gehanteerde conventie. In MODFLOW worden kolommen geassocieerd met de X-richting en rijen met de Y-richting. In MODGRID is dit omgekeerd, omdat de associatie tussen van links naar rechts met de X-richting en van beneden naar boven (eigenlijk van voor naar achter) met de Y-richting meer voor de hand ligt. Bij het inlezen van MODFLOW bestanden die niet met MODGRID zijn aangemaakt wordt deze conversie niet automatisch gemaakt. In sommige gevallen blijkt dan ook dat de volgorde van rijen omgedraaid moet worden. Dit kan bewerkstelligd worden door in het MODFLOW-bestand met dimensies (het .BAS-bestand) voor de betreffende dimensie een minteken toe te voegen.
(Het bedoelde getal is het derde op record nummer 3 van het .BAS bestand, voorstellend de MODFLOW parameter NCOL).

1.3 Import Generic Data Set

Deze menukeuze is bedoeld om aan alle cellen in het huidige rooster waarden toe te kennen voor een of alle parameters in het bestand MODGRID.PAR.

Eerst wordt aan alle cellen de default-waarde toegekend. Per parameter wordt vervolgens de generieke informatie (=metingen, interpolaties etc.) gespecificeerd in een bestand gebruikt om interpolaties af te leiden voor de betreffende cellen.

De enige in te voeren informatie betreft:

- keuze tussen overlay voor 1 of alle parameters. Na de keuze 1 parameter moet de betreffende parameters nog gekozen worden.

1.4 Subset Output (Parallel)

Deze menukeuze is bedoeld om een deel van het rooster als apart MODGRID-bestand op te slaan. Achtereenvolgens moet aangegeven worden:

- het blokvormige deelgebied van het rooster. Hierover wordt de standaard manier om blokken aan te geven gebruikt (zie 4.2: **Select Block**).
- de naam van het nieuw aan te maken MODGRID bestand.

Nota Bene: Als voor het 'moedersmodel' aparte data-configuratiebestanden (met respectievelijke dimensies .PAR en .VAR) zijn aangemaakt, dan worden deze bestanden automatisch ook geproduceerd voor het detailmodel.

1.5 Subset Output (Oblique)

Deze menukeuze is bedoeld om een MODGRID bestand aan te maken voor een blokvormig deelgebied. Deze optie kan alleen met een actieve muis gebruikt worden. In de praktijk worden alleen scheve detailmodellen afgeleid die in het horizontale vlak gedraaid zijn. Met de muis of cursortoetsen moet achtereenvolgens aangegeven worden:

- de oorsprong van het nieuwe deelgebied (in het XY-vlak).
- de begrenzing in de nieuwe X-richting.
- de begrenzing in de nieuwe Y-richting.

Nadat op deze wijze de begrenzing van het detailmodel is vastgesteld dient een basisstapgrootte voor de nieuwe X- en Y-richtingen opgegeven te worden. Deze stapgrootte mag niet groter zijn dan de totale afmeting in de betreffende richting, en niet kleiner dan toegestaan in verband met de maximale dimensies van de data-array.

Nota Bene: Het kan handig zijn om van tevoren de maximale array dimensies aan te passen met menukeuze 7.8 (SPECIAL-Change Array Boundaries).

Nota Bene: Als er voor het 'moedermodel' aparte data-configuratiebestanden (met respectievelijke dimensies .PAR en .VAR) zijn aangemaakt, dan worden deze bestanden automatisch ook geproduceerd voor het detailmodel.

1.6 Generate MODFLOW Input

Deze menukeuze is bedoeld om voor het huidige MODGRID bestand een set MODFLOW-invoerbestanden te maken. Voor het aanmaken moet een databestand aangemaakt zijn (door aanroepen van submenukeuze 1.3 van het DATA menu: Import Generic Data Set). Als dit niet is gebeurd wordt een foutboodschap van die strekking in de statusbalk onderaan het scherm getoond.

Is er wel een bestand, dan moet gekozen worden tussen de Freatische of de Confined situatie, door het invoeren van de letter 'F' of 'C' respectievelijk. Meer achtergrond over deze keuze wordt gegeven in paragraaf 7 van de programmabeschrijving. Na het maken van de keuze worden alle MODFLOW invoerbestanden aangemaakt die voor een simulatie van het gevraagde type met MODFLOW nodig zijn. Het programma maakt melding van de voortgang door het vertonen van boodschappen in de statusbalk. Na afloop is het programma weer in Cursor Navigation Mode. Zie voor de defaultwaarden van MODFLOW-sturingsparameters bijlage V.

1.7 Vector GIS output

Deze menukeuze leidt tot aanmaak van een polygonencoverage in een bestand met een zogenaamd .BNA-formaat. Elke geselecteerde gridcel wordt als vierhoekige polygoon behandeld.

Nota Bene Met het commando *ATLASARC* uit de *GRID CONVERSION Module* van *ARC/INFO* kan het geproduceerde .BNA bestand geïmporteerd worden.

Uit een .BNA bestand kan ARC/INFO de topologie van het MODFLOW-rooster opbouwen. Het .BNA-formaat laat echter niet toe dat er per polygoon meer dan één parameterwaarde (attribuut) wordt gespecificeerd. Omdat het vaak gewenst is alle modelinvoer en -uitvoer beschikbaar te hebben voor alle cellen (en bovendien voor alle lagen van het model) wordt per modellaag een extra bestand in ASCII-formaat geproduceerd.

Terwille van een optimale koppeling met ARC/INFO zijn dit dBase III/IV-compatible bestanden. Elk bestand bestaat uit evenveel regels als er per modellaag geselecteerde cellen zijn.

1.8 SURFER Grid File Output

Deze menukeuze leidt tot aanmaak van een bestand met de structuur van SURFER Grid bestanden. Na selectie van een rechthoekig deelgebied en de stapgrootte in de beide coördinaatrichtingen van het huidige vlak wordt voor de huidige laag de verdeling van de waarden voor de actieve parameter weggeschreven in SURFER formaat. Het geproduceerde bestand dat naar keuze binair of ASCII kan zijn krijgt een extensie bestaand uit een getal dat bestaat uit de numerieke code van de actieve parameter (zie bestanden MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR), voorafgegaan door een letter die het bestandstype aangeeft (A voor ASCII en B voor binair). De geproduceerde bestanden kunnen rechtstreeks worden ingelezen door de SURFER module TOPO.

1.9 STYXZ Format File Output

Deze menukeuze biedt de mogelijkheid om een (deel van een) datamatrix in een speciaal formaat uit te voeren. De optie is vooral van belang bij het modelleren van massatransport met het transportmodel STYXZ aansluitend aan een berekening van de grondwaterstroming met MODFLOW.

De structuur van het bestand is:

```
((IX, JY, (VALUE(IX, JY, KZ), KZ=NZ, 1, -1), JY=1, NY), IX=1, NX)
```

Dat wil dus zeggen dat op één regel de waarden voor alle modellen staan, genummerd van boven naar beneden. De volgorde van de regels is: eerst lopen de rijen op (Y-richting) en dan de kolommen (X-richting). Het formaat is: 2I5, 100E15.7. Dit formaat is zo gekozen, dat geen nauwkeurigheid verloren gaat bij het wegschrijven in ASCII-formaat, en zodanig, dat de getallen altijd door tenminste 1 spatie gescheiden zijn. Hierdoor zijn ze met een zogenaamde FREE FORMAT READ STATEMENT in te lezen door een ander programma.

Na het activeren van de menukeuze moet de parameter gekozen worden waarvoor de uitvoer gewenst is. Deze keuze gebeurt met een scroll bar, zoals beschreven onder submenukeuze Set Parameter in het DATA hoofdmenu-item.

Na het invoeren van de gewenste parameter meldt het programma dat het gewenste bestand wordt geschreven. De naamgeving is eenvoudig: de bestandsnaam is dezelfde als die van het huidige model en de extensie is gelijk aan een letter (i voor invoerparameters en o voor uitvoerparameters) gevolgd door het rangnummer van de datamatrix in het dataconfiguratie-bestand (MODGRID.PAR voor invoergegevens of MODFLOW.VAR voor uitvoergegevens). Voorbeeld: een bestand met waarden van Initial Head (invoerparameter 14) krijgt de extensie '.i14', de uitvoervariabele Computed Head (uitvoerparameter 1) krijgt de extensie '.o01'.

1.10 STYXZ Water Balance Files

Deze keuze leidt tot het aanmaken van twee bestanden met de extensies .ST1 en .ST2. In het bestand met extensie .ST1 wordt per eindige differentiecel het volume en een zogenaamde eigenschappen-indicator beschreven in het door het WL-transportmodel STYXZ benodigde formaat. In het bestand met extensie .ST2 wordt de waterbalans per eindige differentiecel beschreven in het door het WL-transportmodel STYXZ benodigde formaat.

Nota Bene Er kan alleen een waterbalans-bestand worden aangeleverd als er berekeningsresultaten beschikbaar zijn in een Output Data Matrix bestand (extensie .ODM). Een dergelijk bestand wordt aangemaakt bij stationaire berekeningen met de WL-versie van MODFLOW. Een andere vereiste is, dat de capaciteit van het programma groot genoeg is. Als het produkt van het aantal rijen, kolommen en lagen groter is dan een vaste grenswaarde, dan kan MODGRID geen waterbalansbestanden aanmaken voor het onderhavige model. Neem contact op met DELFT HYDRAULICS om dit probleem te verhelpen. Bij het bepalen van het volume van de cellen wordt gebruik gemaakt van de waarden van de parameter dikte uit het Input Data Matrix bestand. Het gaat daarbij om het totale volume, dus grond + water! De porositeit is dus niet verdisconteerd in dit volume.

1.11 MODPATH Input Files

Deze menukeuze is bedoeld om het aanmaken van vaak omvangrijke MODPATH Input Files te automatiseren. Het betreft de files:

- main.dat, waarin de waarden van fysische parameters in alle cellen staat (kolombreedtes, rijkhoogtes, maaiveldligging, top, bodem, activiteit en porositeit);
- files.dat, waarin staat aangegeven welke modules actief zijn;
- een file met extensie .FLO, die een combinatie is van de Constant Head Flows en de Side Flows.

Nota Bene Er kunnen alleen een MODPATH Input Files worden aangemaakt als er berekeningsresultaten beschikbaar zijn in een Output Data Matrix bestand (extensie .ODM). Een dergelijk bestand wordt aangemaakt bij stationaire berekeningen met de WL-versie van MODFLOW.

1.12 Quit MODGRID

Deze keuze beëindigt het programma en brengt de gebruiker terug in de omgeving van waaruit MODGRID werd opgestart.

Hoofdmenukeuze 2: GRID

Keuze van deze hoofdmenuoptie activeert een submenu van 9 mogelijkheden, gerelateerd aan de roosterlijnen die het probleem domein onderverdelen in rechthoekige blokken. Het submenu omvat de volgende keuzes:

- 1 Insert Grid Lines
- 2 Cross-section XY
- 3 Cross-section XZ
- 4 Cross-section YZ
- 5 Zoom Subarea
- 6 Zoom Current Cross-Section XY
- 7 Zoom Current Cross-Section XZ
- 8 Zoom Current Cross-Section YZ
- 9 Undo Zoom

2.1 Insert Grid Lines

Deze menukeuze is bedoeld om het huidige rooster te verfijnen. Verfijning in de X-richting is alleen mogelijk als de huidige getoonde dwarsdoorsnede de code XY of XZ heeft. Hetzelfde geldt voor verfijning in de Y- en de Z-richting. Achtereenvolgens moet worden ingevoerd:

- het blokvormige deelgebied van het probleemdomein waarin lagen/ rijen/kolommen onderverdeeld moeten worden (Hiervoor wordt de standaard manier van blokselectie gebruikt. Zie menukeuze **4.2: Select Block**)
- de verfijningsfactor in de eerste richting. Dit moet een geheel getal zijn in het interval [1..5]. Keuze van 1 betekent: in deze richting niet onderverdelen.
- de verfijningsfactor in de tweede richting. Dit moet een geheel getal zijn in het interval [1..5]. Keuze van 1 betekent: in deze richting niet onderverdelen.

Voor het verfijnde rooster moet een nieuwe modelnaam ingevoerd worden (eventueel inclusief drive-letter en pad). Op basis van het dimensiebestand (met extensie .DIM) wordt een dimensiebestand aangemaakt met dezelfde extensie maar met de nieuw gekozen modelnaam. Alle data- en configuratiebestanden die betrekking op het oorspronkelijke ('moeder') rekengeval hebben worden vervolgens gekopieerd naar corresponderende bestanden met dezelfde extensie maar met de nieuw gekozen modelnaam:

- data-configuratiebestanden (indien aanwezig) met extensie .PAR en .VAR
- topografische overlaykaartjes (indien aanwezig) met extensies .XY, .XZ en .YZ
- bestanden met beschrijving van generieke invoerdata per invoerparameter, met extensies zoals gespecificeerd in dataconfiguratiebestand MODGRID.PAR

Indien voor het 'moeder' rekengeval een Input Data Matrix bestand (.IDM) aanwezig is, dan worden voor het nieuwe, onderverdeelde modelrooster parameterwaarden voor de nieuwe gridcellen bepaald door interpolatie. Het type interpolatie wordt per parameter bepaald door een codeletter in het dataconfiguratiebestand MODGRID.PAR (of de door de gebruiker aangemaakte modelspecifieke versie daarvan). Zie voor de gebruikte coderingen en hun betekenis bijlage VI.

Als voor het moedergeval een Named Area bestand (met extensie .NAR) aanwezig is, dan wordt hiervan een corresponderende versie gemaakt voor het nieuwe rekegeval. Daarbij worden per gebied de cellen die in het moedermodel geselecteerd zijn ook geselecteerd in het nieuwe verfijnde model. Alle nieuwe cellen die een oude vervangen worden daarbij geselecteerd als de oorspronkelijke cel geselecteerd is.

2.2-2.4 Cross-section XY/XZ/YZ

Deze 3 menukeuzes zijn bedoeld voor het kiezen van de gewenste doorsnede door het rooster. Na het starten van het programma wordt automatisch de XY-doorsnede gekozen. Bij het kiezen van een nieuwe doorsnede wordt steeds die doorsnede gekozen waarin de cursor zich op het moment van kiezen bevindt.

2.5 Zoom Subarea

Deze menukeuze is bedoeld om bepaald deel van het rooster met meer detail te kunnen analyseren of bewerken. Voor het bepalen van het deelgebied wordt gebruik gemaakt van de standaard manier om blokken aan te geven (zie menukeuze **4.2 Select Block**). Zoomen kan herhaald toegepast worden tot maximaal het niveau van één cel.

Nota Bene Na selectie van een deelgebied met Zoom Subarea is de werking van sommige menukeuzes die met een selectie te maken hebben veranderd!

Dit zijn:

- **4.4 Select Cross-section**
- **4.5 Select on Condition**
- **4.6 Select All**

Deze menukeuzes zijn gekoppeld aan het gekozen deelgebied d.w.z. dat Select All betekent alle cellen in het deelgebied i.p.v. alle cellen in het hele rooster.

2.6-2.8 Zoom Current Cross-Section XY / XZ / YZ

Deze menukeuzes zijn bedoeld om het XY / XZ of YZ vlak waarin de roostercursor zicht thans bevindt te kiezen als het gezoomde deel van het rooster. Deze keuze kan bijvoorbeeld handig zijn als in het getoonde vlak een **Select on Condition (Menukeuze 4.4)** uitgevoerd moet worden. Om te voorkomen dat ook cellen buiten de dwarsdoorsnede geselecteerd worden, moet eerst ingezoomd worden tot op het niveau van een dwarsdoorsnede. Deze menukeuze is een alternatief voor de omslachtiger "blokzoom"selectie, en kan onnodig hertekenen van de huidige dwarsdoorsnede voorkomen.

2.9 Undo Zoom

Deze menukeuze maakt alle voorgaande zoom-acties ongedaan. Het gehele rooster is nu weer actief.

Hoofdmenukeuze 3: DATA

De keuze van deze hoofdmenuoptie activeert een submenu van 11 keuzes, die alle betrekking hebben op het veranderen van gegevens. Het zijn achtereenvolgens:

- 1 Set Active Parameter
- 2 Set Contour Levels
- 3 Set Value
- 4 Modify (Substitute Value)
- 5 Modify (Construct Value)
- 6 Modify (Add Value)
- 7 Modify (Multiply by Value)
- 8 Interpolate Cross-section
- 9 Copy Cross-section
- 10 Copy Computed Head
- 11 Compute Velocities

3.1 Set Active Parameter

Deze menukeuze is bedoeld om één van de beschikbare parameters te kiezen voor weergave en/of bewerking. Er verschijnt een balk onderaan het scherm met de parameternaam. Door met de muis of cursor omhoog of omlaag te bewegen kan "gescrolled" worden door de beschikbare parameters. Achtereenvolgens moet ingevoerd worden:

- de gewenste parameter met muis of cursortoetsen
- bevestiging met [Enter] of linkermuisknop of annulering met [Esc] of rechtermuisknop.

Nota Bene Met de [Home] en [End] toetsen kan naar het begin en het eind van de lijst gesprongen worden. Met de [PageDown] toets springt men naar het eind van de invoerparameters of de uitvoerparameters, afhankelijk van of de getoonde parameter een invoer- of uitvoerparameter is. Op dezelfde manier springt men met de [PageUp] toets naar de eerste invoer- of uitvoerparameter.

3.2 Set Contour Levels

Deze menukeuze biedt de mogelijkheid om de ingestelde contourniveaus te veranderen. Alleen wanneer een parameter actief is (zie **3.1 Set Active Parameter**) wordt een prompt in de statusbalk getoond, waarbij de keuze geboden wordt tussen de default set contourniveaus (D) of een zogenaamde User-defined set contourniveaus (U). Keuze van D herstelt de contourniveaus zoals vastgelegd voor de actieve parameter in het betreffende dataconfiguratiebestand (MODGRID.PAR/MODFLOW.VAR).

Keuze van (U) biedt de mogelijkheid om zelf een set equidistante contouren te definiëren. Bij aanschakelen wordt voor het bepalen van de waarden van de contouren achtereenvolgens de volgende informatie gevraagd:

- De minimale waarde (deze moet minimaal de kleinste waarde in de datamatrix zijn);
 - De maximale waarde (deze mag maximaal de grootste waarde in de datamatrix zijn);
- en (als de minimale en de maximale waarde niet identiek zijn):
- Het aantal tussenliggende contouren (waarbij de afstand tussen de contouren constant is). Het maximum aantal toegestane contouren is twaalf.

Voorbeeld: Om met een stap van 0.5 m contouren te produceren van NAP+10 m tot NAP+13 m moet achtereenvolgens worden opgegeven:

<i>Als Minimale waarde:</i>	10
<i>Als Maximalewaarde:</i>	13
<i>Als Aantal tussenliggende contouren</i>	5

Nota Bene Bij het definiëren van contourniveaus is het handig om de extremen van de verdeling van waarden voor de actieve parameter te kennen. Deze kunnen zichtbaar gemaakt worden in de rechtermarge (boven de kleurschaal van de legenda) door menukeuze 5.9 Toggle Extremes On.

3.3 Set Value

Deze menukeuze biedt de mogelijkheid om een waarde te kiezen aan de hand waarvan met menukeuze Modify (3.4 -> 3.7) gewerkt kan worden. De toelaatbaarheid van een gekozen waarde wordt getoetst aan de hand van de toelaatbare grenswaarden voor de betreffende parameter.

De waarde kan als getal ingetypt worden in een speciale zone op het scherm. Toelaatbare toetsaanslagen zijn:

- cijfers;
- decimale punt (slechts 1 karakter);
- minteken;
- exponentteken [e] of [E].

Nota Bene De toelaatbaarheid van waarden wordt eigenlijk niet correct getoetst. Zo mag geen negatief getal ingevoerd worden voor doorlatendheid, terwijl het voor kan komen dat een bepaalde waarde van elk getal afgetrokken moet worden. Dit kan alleen door een optelling te definiëren met een negatieve waarde.

3.4 Modify (Substitute Value)

Deze menukeuze is bedoeld om aan de hand van een eerder gekozen waarde (zie 3.3 Set Value) voor de geselecteerde cellen een nieuwe parameterwaarde te bepalen. In dit geval wordt de bestaande waarde vervangen door de met menukeuze 3.2 geselecteerde waarde.

Nota Bene De resultaten van de bewerking dienen te liggen binnen het toelaatbare bereik voor de parameter, vastgelegd in het configuratiebestand MODGRID.PAR. Momenteel vindt deze controle nog niet plaats, zodat de gebruiker zelf moet controleren of de resulterende waarden aan deze criteria voldoen. Een handig hulpmiddel hierbij kan zijn menukeuze 5.6: Toggle Extremes On.

3.5 Modify (Construct Value)

Deze menukeuze is bedoeld om voor alle geselecteerde cellen de parameterwaarden te vervangen door een combinatie van 2 andere parameters. Zo kan bijvoorbeeld de dikte van een laag worden bepaald als het verschil tussen onderkant en bovenkant. Achtereenvolgens moeten worden ingevoerd:

- de eerste parameter voor de constructie (P1);
- de tweede parameter voor de constructie (P2);
- de parameter waarvoor de waarde met de constructie bepaald moet worden (P3);
- de vermenigvuldigingsfactor, toe te passen op de eerste parameter (F1);
- idem voor de tweede parameter (F2);
- de gewenste soort constructie: Optellen, vermenigvuldigen of delen.

De corresponderende formules zijn:

Optellen:

$$P3 = F1 * P1 + F2 * P2$$

Vermenigvuldigen:

$$P3 = (F1 * P1) * (F2 * P2)$$

Delen (mits $(F2 * P2) < > 0$):

$$P3 = \frac{F1 * P1}{F2 * P2}$$

3.6 Modify (Add Value)

Deze menukeuze is bedoeld om aan de hand van een eerder gekozen waarde (zie 3.3 **Set Value**) voor de geselecteerde cellen een nieuwe parameterwaarde te bepalen. In dit geval wordt bij de bestaande waarde de met menukeuze 3.3 geselecteerde waarde opgeteld.

3.7 Modify (Multiply Value)

Deze menukeuze is bedoeld om aan de hand van een eerder gekozen waarde (zie 3.3 **Set Value**) voor de geselecteerde cellen een nieuwe parameterwaarde te bepalen. In dit geval wordt de bestaande waarde vermenigvuldigd met de met menukeuze 3.3 geselecteerde waarde.

3.8 Interpolate Cross-section

Deze menukeuze is bedoeld om voor één of meer dwarsdoorsneden de waarde per cel toe te kennen. Daarbij wordt lineair geïnterpoleerd tussen 2 begrenzende doorsneden. De weegfactoren worden afgeleid uit de afstand tot de begrenzende doorsneden. Achtereenvolgens moet worden ingevoerd:

- het nummer van de eerste begrenzende doorsnede (i)
- het nummer van de tweede begrenzende doorsnede (j)

Voor alle doorsneden met een rangnummer groter dan i en kleiner dan j wordt de parameterwaarde door lineaire interpolatie bepaald.

3.9 Copy Cross-Section

Deze menukeuze is bedoeld om voor de huidige dwarsdoorsnede de parameterwaarden cel voor cel gelijk te maken aan de corresponderende waarden in een aantal aaneengesloten andere evenwijdige dwarsdoorsnedes. De doorsnede waarvan gekopieerd moet worden is de huidige dwarsdoorsnede. Achtereenvolgens moet aangegeven worden:

- het nummer van de eerste dwarsdoorsnede die gelijk gemaakt moet worden aan de huidige;
- het nummer van de laatste dwarsdoorsnede die gelijk gemaakt moet worden aan de huidige.

3.10 Copy Computed Head

Deze menukeuze is bedoeld om berekende potentialen over de initiële potentialen heen te schrijven. De resultaten van een niet geconvergeerde berekening (of aan het eind van een niet complete simulatieperiode) kunnen daarmee gebruikt worden voor het starten van een volgende berekening. De parameter initial head in het Input Data Matrix bestand wordt overschreven door de parameter computed head uit het Output Data Matrix bestand.

De WL-versie van MODFLOW die ook kwelvlakken kan berekenen kan tijdens de berekening de status van cellen veranderen van 1 (actief) naar -1 (constante potentiaal). De optie Copy Computed Head moet hier eigenlijk rekening mee houden. Idealiter schrijft MODFLOW-WL ook de parameter IBOUND weg, zodat behalve Initial Head ook de parameter Activity Parameter geactualiseerd wordt.

3.11 Compute Velocities

Deze menukeuze is bedoeld om fluxen (berekend met MODFLOW en opgeslagen in het uitvoerbestand met de extensie .ODM (Output Data Matrix)) om te zetten in snelheden. Voor iedere flux wordt het doorstroomde oppervlak bepaald uit de gridafmetingen in het horizontale vlak en de dikte. Bij aanmaak van het .IDM-bestand (Input Data Matrix) wordt als default de informatie over bodemhoogte van elke cel in het bestand met de extensie .DIM (Dimensies) gebruikt om de laagdikte per cel te definiëren. De berekende snelheid wordt nog gedeeld door de porositeit om daadwerkelijke snelheden te krijgen.

Hoofdmenukeuze 4 SELECT

Keuze van deze hoofdmenuoptie activeert een submenu van 11 opties die alle te maken hebben met het selecteren van cellen. Het zijn:

- 1 Select Individual
- 2 Select Block
- 3 Select Polygon
- 4 Select on Condition
- 5 Select Cross-Section
- 6 Select All
- 7 Store as Named Area
- 8 Retrieve Named Area
- 9 Toggle XOR Mode ON/OFF
- 10 Extremes in Subset
- 11 Undo Selection

4.1 Select Individual

Deze menukeuze is bedoeld om individuele cellen te selecteren. In de "Select Individual" mode kan met de linkermuisknop of [enter] de cel waarin de cursor zich bevindt geselecteerd worden. Dat een cel geselecteerd is wordt aangegeven met een kruis. Nog een keer op [enter] of de linkermuisknop drukken maakt de selectie weer ongedaan. Alle cursorbesturingsfuncties zijn actief in de selection mode.

4.2 Select Block

Deze menukeuze is bedoeld om een blokvormig deelgebied te selecteren. De selectie begint in de huidige dwarsdoorsnede. Wanneer het model 3D is, moet, nadat een rechthoekig deelgebied is geselecteerd, de uitbreiding in de resterende dimensie bepaald worden. Achtereenvolgens wordt gevraagd om:

- De begrenzing in de huidige dwarsdoorsnede. De cursorpositie op het moment van aanroep is een vast hoekpunt. Met cursor toetsen kan de diagonaal hier tegenover liggende hoek gepositioneerd worden. In de toestandsbalk worden de begrenzende roostercoördinaten getoond. Om het "lopende" hoekpunt te fixeren moet [home] of de linkermuisknop en geannuleerd met [esc] of de rechtermuisknop.
- De doorsnede waarin de resterende dimensie van het blok aangegeven zal worden. Hiervoor zijn 3 lettercodes:

X -> YZ

Y -> XZ

Z -> XY

Vanzelfsprekend zijn er maar 2 keuzes mogelijk in een afzonderlijk geval. Als in het XY vlak bijvoorbeeld een rechthoek gekozen en bevestigd is, dan is de keuze "Z" niet mogelijk. Immers, de resterende dimensie kan alleen in het XZ of YZ-vlak aangegeven worden. Alleen "Y" of "X" zijn in dat geval geldige keuzes.

- De uitbreiding van het blok in de resterende dimensie. Met de cursortoetsen en de [Home]-toets kan deze bepaald worden. Bevestiging gebeurt met [Enter] of de linkermuisknop. In de toestandsbalk worden de nummers van de begrenzende doorsnede getoond.

4.3 Select Polygon

Deze menukeuze is bedoeld om een willekeurige (zichzelf niet snijdende) veelhoek te definiëren, en de cellen die (deels) erbinnen gelegen zijn te selecteren. *Deze optie kan alleen met een actieve muis gebruikt worden!* Bij het starten van deze optie wordt de cursor verplaatst naar het midden van het modelgebied. De in te voeren informatie is achtereenvolgens:

- het startpunt van de polygoon. Dit kan bepaald worden door de roostercursor te verplaatsen d.m.v. van de muis. Bevestiging met de linkermuisknop 'verankert' het startpunt.
- de achtereenvolgende hoekpunten, waarvan de coördinaten in de statusbalk getoond worden. Er wordt steeds een 'rubber band line' getekend tussen het laatst geselecteerde hoekpunt en de roostercursor. Een hoekpunt wordt geselecteerd door bevestiging met de linkermuisknop. De achtereenvolgende keuzes kunnen weer ongedaan gemaakt worden door achtereenvolgens op de rechtermuisknop te drukken. Om de polygoon te sluiten moet het eindpunt van het te selecteren lijnstuk voldoende dicht bij het startpunt gekozen worden. In de statusbalk verschijnt dan de vraag 'Close Polygon ? (Y/N)'. Na bevestiging worden de geselecteerde cellen getoond.
- is eenmaal een polygoon geselecteerd in de huidige dwarsdoorsnede, dan kan deze gekopieerd worden naar een aaneengesloten blok evenwijdige doorsneden. Hiertoe moet met dezelfde actie als in **Select Block** het bereik aangegeven worden waarnaar de polygoon van geselecteerde cellen gekopieerd moet worden.

4.4 Select on Condition

Deze menukeuze is bedoeld om alle cellen te selecteren, waarvan de parameterwaarde tussen een gegeven benedengrens en dito bovengrens liggen. Achtereenvolgens moeten worden ingevoerd:

- de benedengrens
- de bovengrens

4.5 Select Cross-Section

Deze menukeuze is bedoeld als "voorgeprogrammeerde" Select Block keuze. Select Cross-Section selecteert alle cellen in de huidige getoonde dwarsdoorsnede.

4.6 Select All

Deze menukeuze is bedoeld als "voorgeprogrammeerde" Select Block keuzes. Select All selecteert alle cellen in het gehele rooster.

Nota Bene *Menukeuzes 4.2 t/m 4.6 zijn afhankelijk van het inzoomen. Deze functies nemen de grenzen van het laatst ingezoomde blok aan als de grenzen van het rooster.*

4.7 Store as Named Area

Deze menukeuze is bedoeld om de thans geselecteerde verzameling cellen van een label te voorzien. Daartoe wordt de verzameling opgeslagen onder een zelf te kiezen naam.

De in te voeren informatie bestaat uit:

- de naam voor de verzameling cellen.

4.8 Retrieve Named Area

Deze menukeuze is bedoeld om een eerder geselecteerd gebied op het modelgebied te projecteren. De in te voeren informatie bestaat uit:

- de naam van het te selecteren gebied, die gevonden kan worden door met de muis of cursortoetsen door de lijst van beschikbare gebieden te "scrollen".

4.9 Toggle XOR mode ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar om "negatieven" te maken van geselecteerde verzamelingen. Standaard staat de XOR mode uit. Dat wil zeggen dat bij het selecteren van bijvoorbeeld een blok alle cellen in dat blok geselecteerd worden, onafhankelijk van of de cel al geselecteerd was.

Als de XOR mode wordt aangezet en vervolgens wordt een blok geselecteerd, dan worden alleen cellen geselecteerd die nog niet geselecteerd waren. De reeds geselecteerde cellen worden ge"ont"selecteerd. Of de XOR aan of uit staat is te zien aan de menukeuze zelf. Luidt deze Toggle XOR Mode ON, dan staat de XOR mode uit, en vice versa.

4.10 Extremes in Subset

Deze menukeuze levert als resultaat dat voor de geselecteerde groep cellen de extreme waarden van de actieve parameter getoond worden in een tijdelijke statusbalk onder de vaste statusbalk, alsmede de roostercoördinaten van de cellen waar deze extreme waarden optreden.

4.11 Undo Selection

Deze menukeuze is bedoeld om alle geselecteerde cellen, ongeacht zoomgebied of XOR mode, te "ont"selecteren.

Hoofdmenukeuze 5: DISPLAY

Keuze van deze hoofdmenu-optie activeert een submenu van 10 mogelijkheden, die alle te maken hebben met welke elementen getoond worden in de huidige dwarsdoorsnede. Het zijn:

- 1 Toggle Discrete Map ON/OFF
- 2 Toggle Continuous Map ON/OFF
- 3 Toggle Isolines ON/OFF
- 4 Toggle Grid Lines ON/OFF
- 5 Toggle Map Overlay ON/OFF
- 6 Toggle Vector Plot ON/OFF
- 7 Toggle Pathlines ON/OFF
- 8 Toggle Value Display ON/OFF
- 9 Toggle Extremes ON/OFF
- 10 Toggle 1:1 Drawing ON/OFF

5.1 Toggle Discrete Map ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar voor het tonen van gekleurde, gevulde contourenplaatjes. Hiermee wordt de verdeling van de huidige parameter getoond met kleurcodes behorend bij een intervalschaal die in het configuratiebestand MODGRID.PAR is gedefinieerd.

Nota Bene: Als deze keuze geactiveerd wordt terwijl tegelijkertijd *Isolines* of *Continuous Map* op ON staat, dan worden die schakelaars automatisch OFF gezet.

5.2 Toggle Continuous Map ON/OFF

Deze menukeuze heeft dezelfde functie als menukeuze 5.1. Het verschil zit in de grafische weergave. De continuous mode plot toont een op pixelbasis geïnterpoleerde verdeling van waarden, hetgeen een vloeiend verloop geeft.

Nota Bene: Als deze keuze geactiveerd wordt terwijl tegelijkertijd *Discrete Map* of *Isolines* op ON staat, dan worden die schakelaars automatisch OFF gezet.

5.3 Toggle Isolines ON/OFF

Deze menukeuze dient als schakelaar om de verdeling van waarden voor de actieve parameter in de vorm van een of meer isolijnen te tonen voor de gekozen doorsnede. Het maximum aantal te tekenen isolijnen is 12.

Nota Bene: Als deze keuze geactiveerd wordt terwijl tegelijkertijd *Discrete Map* of *Continuous Map* op ON staat, dan worden die schakelaars automatisch OFF gezet.

5.4 Toggle Grid Lines ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar voor het tonen van de roosterlijnen in de huidige doorsnede.

5.5 Toggle Map Overlay ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar voor het tekenen van een gebiedskaart over de (eventuele) rooster lijnen en de (eventuele) contourenkaart. De kaart wordt gekleurd aan de hand van een door de gebruiker aan te maken digitalisatie bestand. Zie voor de beschrijving van dergelijke bestanden Bijlage VII. Per doorsnede (XY, XZ, YZ) kan een apart bestand opgegeven worden.

5.6 Toggle Vector Plot ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld om een vectorrepresentatie te tonen van het snelheidsveld in het huidige getoonde window. De component loodrecht op het scherm blijft buiten beschouwing. Vorm en grootte van de vectorpijlen kunnen worden aangepast door het verandering van een record in het configuratiebestand MODGRID.CFG. Om daadwerkelijk snelheden te krijgen, moet een conversie van de met MODFLOW berekende fluxen worden uitgevoerd. In de eerste plaats wordt elke flux gedeeld door het doorstroomde oppervlak, en ten tweede wordt het resultaat gedeeld door de porositeit van het doorstroomde volume. Deze conversie kan worden uitgevoerd met menukeuze 3.11 (**DATA Compute Velocities**).

5.7 Toggle Pathlines ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld om eventueel beschikbare stroombanen te projecteren op de huidige dwarsdoorsnede. Het programma zoekt naar een bestand met een gegeven naam en extensie en plot de stroombanen op basis van de informatie erin. Zie bijlage VII voor de vereiste vorm van stroombaangegevens. De stroombaan wordt getekend in verschillende kleuren. Elk lijnstukje met een bepaalde kleur representeert de weg die is afgelegd in een bepaald tijdsinterval (dat moet worden aangegeven bij het starten van MODPATH).

Nota Bene Om de benodigde files te verkrijgen is het noodzakelijk dat men de WL-versie van MODPATH gebruikt.

5.8 Toggle Value Display ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar voor het tonen van de exacte parameterwaarde in de huidige cel. Dit is een handige aanvulling op de contourenkaart, waaruit per cel alleen een interval afgelezen kan worden. De waarde voor de huidige parameter in de cel waar de cursor zich bevindt wordt getoond in een aparte balk onderaan het scherm.

5.9 Toggle Extremes ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar voor het tonen van de extreme waarden in de huidige actieve datamatrix. Als de schakelaar wordt aangezet verschijnen rechts op het scherm, boven de legenda, de extrema en hun roostercoördinaten voor de datamatrix als geheel en voor de getoonde dwarsdoorsnede. Er moet een parameter gekozen zijn wil het effect van de schakelaar zichtbaar zijn.

5.10 Toggle 1:1 Drawing ON/OFF

Deze menukeuze is bedoeld als schakelaar voor de horizontale of verticale vertekening van de getoonde dwarsdoorsnede. Als de schakelaar OFF staat wordt het te tonen plaatje zodanig opgerekt, dat het gehele beschikbare gedeelte van het scherm beslaat. Om een niet-vertekend plaatje te krijgen (waarbij dan meestal de duidelijkheid van de tekening iets afneemt) moet de schakelaar ON gezet worden.

Nota Bene Het functioneren van deze optie is afhankelijk van het type scherm van de gebruikte computer. Het getal dat de vervorming van pixels aangeeft (de zogenaamde ASPECT RATIO) kan desnoods aangepast worden in het configuratiebestand MODGRID.CFG.

Hoofdmenukeuze 6: PRINT

Deze hoofdmenukeuze activeert een submenu van 2 onderdelen, beide bedoeld om grafische uitvoer op te slaan op schijf of te printen op papier. Het zijn:

6.1 HALO Picture File

Deze menukeuze 'vangt' het huidige scherm en slaat het op in twee bestanden (een zogenaamde bitmap en een paletbestand), waaruit het oorspronkelijk beeld opgebouwd kan worden. In een en dezelfde MODGRID sessie kunnen meerdere schermen op deze manier opgeslagen worden. Elke set bestanden krijgt een rangnummer, dat is terug te vinden in de laatste 2 karakters van de extensie. De bitmap krijgt als extensie .p##, en het paletbestand g##, waarin ## het rangnummer is.

Nota Bene Er kunnen niet meer dan 99 plaatjes gemaakt worden in één MODGRID sessie.

Bij het opnieuw opstarten van MODGRID worden oude bestanden overschreven. De gebruiker dient de geproduceerde bestanden zelf te hernoemen of te verplaatsen als ze bewaard moeten blijven.

Met het programma Dr Proto (geleverd door HALO Professional Graphics) kunnen aldus opgeslagen schermen zichtbaar gemaakt worden en eventueel voorzien van extra teksten en figuren.

6.2 Send Image to Printer

Deze menukeuze stuurt het huidige scherm naar een grafische printer. Om deze keuze te kunnen gebruiken moet in het configuratiebestand MODGRID.CFG de locatie van betreffende HALO Printer Driver gespecificeerd worden.

Nota Bene Deze optie is in de praktijk nog niet gebruikt bij WL. Neem aub contact op met WL over gebruik van deze mogelijkheid.

Hoofdmenukeuze 7: SPECIAL

Deze hoofdmenukeuze activeert een submenu van 11 onderdelen, die alle een speciale functie hebben. Het gebruik van deze functies vereist enge ervaring in het gebruik van MODGRID.

Het zijn:

- 1 Data Overview for Cell
- 2 Display Generic Data
- 3 Data from Oblique Overlay
- 4 Areal Water Balance
- 5 Convergence History
- 6 Calibration
- 7 Compare
- 8 Change Array Boundaries
- 9 Surface Water Module
- 10 Time Series Statistics
- 11 Polder Level Module

7.1 Data Overview for Cell

Deze menukeuze is bedoeld om voor de cel waarin de cursor zich bevindt een overzicht te geven van alle invoerparameters en MODFLOW-variabelen. Behalve de waarde in de cel zelf worden ook de waarden van de aangrenzende cellen in de X, Y en Z-richting gegeven. De volgende keuzemogelijkheden bestaan:

- [P] of [p]: deze keuze biedt de mogelijkheid om een parameter te kiezen op dezelfde manier als na menukeuze 3.1 (DATA-Select Parameter)
- [W] of [w]: deze keuze biedt de mogelijkheid om een waterbalans te tonen, d.w.z. alle waterstromen door de zijvlakken van de huidige cel naar naburige cellen.
- [Esc] of rechtermuisknop: deze keuze brengt het programma terug in de Cursor Navigation toestand.

7.2 Display Generic Data

Bij het ontwerpen van een rooster speelt de gewenste mathematische nauwkeurigheid een belangrijke rol. Idealiter wordt een rooster met een zeer groot aantal equidistante gridlijnen gebruikt. In de praktijk is het aantal gridlijnen echter beperkt en om die reden zijn niet-uniforme roosters soms te verkiezen. In het bijzonder moet het rooster het fijnst zijn dáár waar sterke gradiënten in parameterwaarden of randvoorwaarden voorkomen. Rond de plaats van een voorgenomen ingreep moet voldoende detail in het rooster opgenomen worden, ook in de referentiesituatie, zodat de situaties met en zonder ingreep goed vergeleken kunnen worden. Hiervoor is een digitale topografische kaart als achtergrond bij het ontwerpen erg handig.

De ruimtelijke verdeling van de hydrogeologische randvoorwaarden en parameters voor het probleemdomen moet dus ook idealiter tijdens het gridontwerp zichtbaar zijn.

De menukeuze Display generic Values biedt de mogelijkheid om deze waarden te laten zien. Daarbij wordt de bij de gekozen parameter geldende intervalschaal gebruikt voor de weergave in kleur. Momenteel kunnen Vector Gis bestanden, SURFER interpolatiebestanden en Thiessen triangulatievelden getoond worden. Zie bijlage I voor de toegelaten types van specificatie van generieke data.

7.3 Data from Oblique Overlay

Deze menukeuze is bedoeld om voor een modelgebied dat is gedefinieerd met Oblique Subset Output (Oblique) [zie menukeuze 1.5] de invoergegevens af te leiden. Er wordt automatisch een Input Data Matrix (.IDM) bestand gecreëerd, waarbij naar oppervlakte gewogen gemiddelde waarden per element bepaald worden.

7.4 Areal Water Balance

Deze menukeuze is bedoeld om voor een deelgebied een waterbalans samen te stellen en te visualiseren, op basis van berekeningsresultaten. De berekeningsresultaten moeten beschikbaar zijn in de vorm van een Output Data Matrix bestand (.ODM bestand), zoals geproduceerd kan worden met de WL-versie van MODFLOW. De informatie die achtereenvolgens ingevoerd moet worden is:

- de naam van het gebied waarvoor de waterbalans samengesteld moet worden. De keuze van de gebiedsnaam wordt behandeld bij de menukeuze 4.8 (**SELECT Retrieve Named Area**).

Voor alle cellen die dit gebied omvat worden de waterbalanscomponenten uit de resultatenbestand verzameld. Vervolgens kan een willekeurige component gekozen worden (zie voor de beschrijving van de werkwijze menukeuze 2.1 (**DATA Select Parameter**)). De verdeling van waarden van deze component wordt vervolgens getoond op het scherm. Na het verlaten van de MODGRID-sessie is in een file met extensie .msg een overzicht te zien van de waterbalansen voor de opgevraagde gebiedjes.

7.5 Convergence History

Deze menukeuze toont de achtereenvolgende potentiaalverdelingen zoals MODFLOW die iteratief berekent. Omdat de convergentie naar de juiste waarde vaak moeizaam verloopt kan een visuele inspectie van de tussentijdse resultaten een aanduiding geven van de oorzaak van de convergentieproblemen. Meestal is deze oorzaak gelegen in incorrecte waarden van modelparameters. Door gebruikmaking van het selectiemechanisme van MODGRID kunnen de betreffende cellen geselecteerd worden, waarna er een bewerking op uitgevoerd kan worden.

7.6 Calibration

Deze menukeuze is bedoeld om een automatische calibratie uit te voeren. Hiervoor dient een bestand met waarnemingen dat bedoeld is voor de calibratie beschikbaar te zijn in de huidige directory. De extensie van dit bestand is .CLI (CaLibration Input). Voor de opgegeven waarnemingen wordt de berekende waarde geïnterpoleerd uit de berekende waarde voor de omliggende roosterpunten. De resultaten worden in tabelvorm weggeschreven naar een bestand met extensie .CLO (CaLibration Output). Bovendien wordt het resultaat weggeschreven in de Output Data Matrix bestand (output parameter no. 14), zodat een visuele presentatie en analyse mogelijk is.

7.7 Compare

Deze menukeuze dient om een nieuw scherm te laten tekenen met meerder doorsneden van het modelgebied. Daarbij worden de tekeninstructies bepaald door een sturingsbestand met de extensie .CMP. Hierin wordt aangegeven wat in de horizontale richting en wat in de verticale richting gevarieerd wordt. Variatie is in principe mogelijk in 4 zogenaamde dimensies:

- CROSS-SECTION, gespecificeerd door een vlakaanduiding (XY, XZ of YZ), het rangnummer van het betreffende vlak en de begrenzendende roostercoördinaten van de te tekenen rechthoek.
- PARAMETER, gespecificeerd volgens dezelfde volgorde als bij het selecteren van parameters. Deze volgorde komt overeen met de parametervolgorde in de configuratiebestanden met achtereenvolgens de extensie .PAR en .VAR.
- SCENARIO, gespecificeerd als een bestandsnaam
- TIMESTEP, gespecificeerd als een rangnummer uit een tijdreeks (nog niet volledig operationeel)

Zie voor de vereiste layout van het sturingsbestand met dimensie .CMP bijlage IV.

Nota Bene In de getekende doorsneden worden parameterverdelingen, overlays van topografische kaarten, roosterlijnen en vectorpijlen alleen getekend als de betreffende schakelaar op ON staat.

7.8 Change Array Boundaries

Deze menukeuze is bedoeld om de beschikbare geheugenruimte optimaal te kunnen benutten. Als in een richting het maximaal aantal cellen bereikt is en toch verder verfijnd moet worden terwijl in een andere richting het maximale aantal cellen nog niet is benut dan kan deze keuze van belang zijn.

Bij het opzetten van een model worden de Array Boundaries vastgesteld voor de X, Y en Z-richting (zie menukeuze 1.1 FILES New Case). Als de bovengrenzen goed gekozen worden hoeft Change Array Boundaries niet gebruikt te worden. Bij zeer grote modellen kan het een nuttige optie zijn.

In een "vraagbalk" kunnen de gewenste maximale aantallen ingevuld worden voor de X, Y en Z-richting.

7.9 Surface Water Module

Met deze menukeuze wordt een module geactiveerd die nog niet volledig operationeel is. *Deze optie kan alleen met een actieve muis gebruikt worden.* De bedoeling is om interactief een rivier 1-dimensionaal te schematiseren met de getekende doorsnede als achtergrond. Per riviersegment moet voor 3 attributen (parameters) een waarde opgegeven worden. Dit zijn:

- de bodemhoogte;
- de waterhoogte; en
- de bodemweerstand.

Als eerste wordt gevraagd of er een rivier geschematiseerd moet worden (keuze D van Define), of dat de parameterwaarden aangepast moeten worden (keuze E van Edit).

De statusbalk geeft te zien:

Mode: Surface Water Module Select (E)dit or (D)efine river systems

Bij de keuze D(efine) wordt vervolgens de naam van de te schematiseren rivier opgevraagd. In totaal kunnen 99 verschillende rivieren onderscheiden worden, met een rangnummer dat mag variëren van 1 tot 99. Als het betreffende nummer al in gebruik is, dan volgt een boodschap met die mededeling, waarna doorgaan(=overschrijven) of opheffen gekozen moet worden.

Het eigenlijke schematiseren gebeurt in de zogenaamde Define River Segments Mode. Het begint met het kiezen van een startpunt met de muis. Na bevestiging met de linkermuisknop moet met de muis een eindpunt gekozen worden. Met het begin- en eindpunt is een lengte-as voor het eerste segment gedefinieerd. Vervolgens kan door verticale beweging van de muis de breedte van het segment vastgesteld worden. In de tijdelijke statusbalk onder aan het scherm wordt de gekozen breedte weergegeven. Na bevestiging met de linkermuisknop moeten de 3 attributen voor het segment een waarde krijgen. Deze getallen kunnen ingetypt worden in de tijdelijke invoerbalk onder aan het scherm. De rechtermuisknop dient steeds om de laatst gemaakte keuze te annuleren.

Op deze wijze kunnen achtereenvolgende segmenten gedefinieerd worden, waarbij het eindpunt van het laatste segment het beginpunt is voor het volgende. De sessie voor een rivier kan beëindigd worden met de [End] toets. Daarna kan gekozen worden voor een volgende rivier of het verlaten van de Define River Segments Mode om terug te keren naar de Cursor Navigation Mode.

De uiteinden van de rechthoekige segmenten worden aan elkaar gesmeed door verlenging van de 'oeverlijnen'. De resultaten van de schematisatie worden weggeschreven naar een bestand met de naam van het huidige model en een extensie bestaande uit de letter 'r' gevolgd door het rangnummer van de rivier. Bijvoorbeeld: als gewerkt wordt aan een model met de identificatie 'proef' wordt de informatie over de rivier met rangnummer 7 bewaard in een bestand met de naam en extensie 'proef.r07'.

Bij de keuze E(dit) wordt vervolgens de naam van de rivier opgevraagd, waarvoor de attribuutwaarden voor een of meer segmenten aangepast moeten worden. In totaal kunnen 99 verschillende rivieren onderscheiden worden, met een rangnummer dat varieert van 1 tot 99. De segmenten van de geselecteerde rivier worden in de huidige dwarsdoorsnede getekend, waarbij de het actieve segment omkaderd is. In de statusbalk is het rangnummer van het actieve segment tussen haakjes aangegeven:

Mode River Module Find Segment (1)

Het actieve segment kan veranderd worden met de cursor-toetsen of de muis, waarbij de huidige attribuutwaarden voor het actieve segment getoond worden in een tijdelijke invoerbalk onder de statusbalk. De toetsen om het actieve segment te veranderen zijn:

- [cursor rechts] (of met de muis naar rechts en/of naar boven) betekent volgende segment;
- [cursor links] (of met de muis naar links of naar beneden) betekent vorige segment;
- [End] betekent naar het laatste segment van de rivier;
- [Home] betekent naar het eerste segment van de rivier;
- [Tab] betekent: verander voor het huidige segment de attribuutwaarden.

Na het indrukken van [Tab] komt het programma in een andere toestand. De statusbalk geeft dan te zien:

Mode Edit Segment Values

terwijl in de tijdelijke invoerbalk nu een veldcursor te zien is die aangeeft dat het betreffende getal veranderd kan worden. Springen naar een ander veld kan met de cursor- toetsen, met [End] en met [Home]. De weergegeven waarde wordt daarmee bevestigd (dit kan ook met [Enter], waarbij de veldcursor naar het volgende veld springt. [Enter] op het laatste veld leidt tot terugkeren naar de 'Find Segment' mode. Ook [Esc] leidt tot terugkeer naar deze mode, maar in dit geval worden de veranderde waarden niet onthouden. Om de River Module te verlaten zijn er twee mogelijkheden:

- 1 met [Ctrl] + [End]. De doorgevoerde wijzigingen voor de laatst veranderde rivier worden bewaard, en MODGRID keert terug naar de Select River to Edit Mode. Deze kan met [Esc] verlaten worden om weer in Cursor Navigation Mode te komen.
- 2 met [Esc]. De doorgevoerde wijzigingen worden niet bewaard, en MODGRID keert terug naar de Select River to Edit Mode. Deze kan met [Esc] verlaten worden om weer in Cursor Navigation Mode te komen.

7.10 Time Series Statistics

Deze menukeuze activeert een prototype van de programmamodule voor analyse van instationaire berekeningsresultaten. Voor de cel waarin de roostercursor zich bevindt wordt een verloop in de tijd gegeven van de huidige actieve uitvoervariabele. Bovendien wordt een histogram voor de gehele simulatieperiode getekend, waarin is aangegeven hoeveel tijdstappen van de simulatieperiode de variabele in een bepaald interval ligt, corresponderend met de schaalniveaus voor de kleurenkaarten. In het geval de actieve uitvoervariabele grondwaterstand is, wordt het verschil tussen maaiveld en grondwaterstand geplot. Het programma maakt daarbij gebruik van de gegevens die zijn opgeslagen in parameter nummer 4 in het Input Data Matrix bestand (Surface Elevation).

Nota Bene Deze analyse kan alleen gemaakt worden wanneer een bestand met berekeningsresultaten voor een niet-stationaire simulatie beschikbaar is. De module test op de aanwezigheid van dit bestand. Voor de extensie van een bestand met niet-stationaire MODFLOW-resultaten, aangemaakt door de WL-versie van MODFLOW, wordt de extensie gebruikt zoals vermeld in het data-configuratiebestand MODFLOW.VAR, waarbij de laatste letter is veranderd van een 'O' in een 'U'. Bijvoorbeeld: Computed Constant Head Outflow heeft als extensie '.CHO'. De corresponderende extensie voor een bestand met niet-stationaire data is '.CHU'.

7.11 Polder Level Module

Deze menukeuze activeert een module die de mogelijkheid biedt om in een polderpeilenkaart interactief de attributen van een peilgebied of polder te veranderen.

Als eerste dient de parameter gekozen te worden waarvoor gegevens van het type Polder gewijzigd moeten worden. Hiervoor kunnen alleen invoerparameters gekozen worden. Uitgangspunt voor deze module, waarvan in MODGRID thans alleen nog een prototype aanwezig is, is een Vector GIS bestand in .PLX formaat. De naam van dit bestand correspondeert met de bestandsnaam in het bestand met sturingsinformatie over generieke gegevens behorend bij de gekozen parameter. Dit is een interne opslagvorm van bestanden in .BNA-formaat die MODGRID hanteert bij het maken van overlays. Met submenukeuze 1.3 (Import Generic Data Set) uit het FILES menu kan een bestand van het .BNA formaat omgezet worden naar .PLX formaat. Als eerste moet de vraag beantwoord worden of de coverage gedefinieerd (D) of aangepast (E) moet worden.

Bij de eerste aanroep moet eerst (D) gekozen worden, anders volgt een mededeling dat er geen .PLX bestand aanwezig is. Na bevestiging van deze foutmelding keert het programma terug naar de Cursor Navigation mode.

In de volgorde van het .BNA-bestand worden de poldergebieden één voor één op het scherm getekend. De gebruiker moet een naam invoeren van maximaal 38 characters voor dit gebied. Na bevestiging wordt de attribuutwaarde die in het .PLX-bestand is opgeslagen voor deze polder getoond in een tijdelijke invoerbalk onder aan het scherm. Behalve het gemiddelde peil kan ook een zomer- en winterpeil aangegeven worden. Thans zijn deze data echter nog niet actief bruikbaar binnen MODGRID. De nieuw ingevoerde waarde voor het gemiddelde peil wordt echter wel in het bestand met de extensie .PLX geschreven.

Na het definiëren van naam en attribuutwaarde van alle polders in het bestand TEST.BNX keert het programma weer terug in de Cursor Navigation Mode.

Eenmaal gedefinieerde coverages kunnen aangepast worden met de keuze (E). Na activering van deze keuze wordt in een tijdelijke scrollende statusbalk de naam van een polder getoond. Met de cursortoetsen omhoog en omlaag (of door corresponderende muisbeweging) kan door de lijst "gescrolled" worden. [Home] brengt de gebruiker naar het begin van de lijst, en [End] naar het einde. De gewenste polder kan gekozen worden met [Enter] of de linkermuisknop.

Het betreffende gebied wordt dan ingekleurd volgens de kleurschaal van de ingestelde parameter. De naam van het gebied kan vervolgens aangepast worden in een tijdelijke invoerbalk onder aan het scherm. Na bevestiging met [Enter] of de linkermuisknop worden de attribuutwaarden getoond in dezelfde invoerbalk. Ook hierin kunnen wijzigingen doorgevoerd worden. Als naam en peil aangepast zijn naar wens kan met [Enter] of de linkermuisknop.

Naam en attribuutwaarden per polder worden weggeschreven in een ASCII bestand met dezelfde naam als het .PLX bestand en de extensie .PLI. Als het formaat gerespecteerd wordt, kunnen hierin de poldernamen met een normale teksteditor aangepast worden.

Nota Bene De attribuutwaarden moeten met MODGRID gewijzigd worden; een wijziging in het .PLI-bestand buiten MODGRID om heeft niet automatisch een corresponderende wijziging van het .PLX bestand tot gevolg. De poldernamen kunnen echter wel gewijzigd worden door het .PLI-bestand met een teksteditor aan te passen.

Bijlage I Structuur van dataconfiguratiebestanden MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR

De parameters waarvoor generieke informatie verwerkt kan worden zijn in volgorde opgesomd in het data-configuratiebestand MODGRID.PAR. Dit bestand bestaat uit 2 blokken gegevens, met steeds 1 regel per parameter, voorafgegaan door een kopregel met informatie ter omschrijving van de navolgende regels. Per parameter wordt in een regel (record) de kenmerkende informatie gespecificeerd.

In blok I wordt aan iedere parameter in een regel toegekend:

- een rangnummer (I2)
- een omschrijving in woorden (A20)
- een aanduiding van de gebruikte eenheid (A10)
- een eenletterige code die bepaalt op welke wijze parameterwaarden worden geïnterpoleerd bij onderverdeling van het rooster (A1). Zie bijlage VI voor de betekenis van deze codes.
- een unieke drieletterige extensie, die het bestand kenmerkt waarin MODGRID zoekt naar generieke informatie over die parameter
- een defaultwaarde voor de parameter (F10.0)
- een minimaal toelaatbare waarde voor de parameter (F10.0)
- een maximaal toelaatbare waarde voor de parameter (F10.0)

De elementen in een record dienen te worden gescheiden door separators. In het voorbeeld is dit de verticale streep (|).

In blok II wordt (in dezelfde volgorde als in blok I) aan iedere parameter in een regel toegekend:

- het aantal intervalwaarden voor de te tekenen contourenplaatjes (I2)
- de opeenvolgende intervalwaarden (van laag naar hoog) (A9). Deze waarden moeten aan de volgende eisen voldoen:
 - het aantal waarden mag niet groter en niet kleiner zijn dan opgegeven met het eerste getal.
 - de opeenvolgende waarden moeten oplopen
 - de laagste waarde mag niet kleiner zijn dan het toelaatbare minimum dat voor dezelfde parameter is opgegeven in blok I
 - de hoogste waarde mag niet groter zijn dan het toelaatbare maximum dat voor dezelfde parameter is opgegeven in blok I

Nota Bene De intervalwaarden kunnen in MODGRID interactief gewijzigd worden. De intervalwaarden in bestand MODGRID.PAR worden echter steeds als default gehanteerd. Als er een schaal gewenst is met ongelijke intervallsafstanden kan dit alleen geregeld worden door het aanpassen van de default legenda.

Voorbeeld van dataconfiguratiebestand MODGRID.PAR

```

no*  DESCRIPT(A20)      *UNIT(A10) *T* ext*default val * max. value *
min value *
1|Khor(x)                |m/d      |Z|.KHX|      7.  |      |1.e+5|      |1.e-10|
2|Khor(y)                |m/d      |Z|.KHY|     10. |      |1.e+5|      |1.e-10|
3|Kvert(z)               |m/d      |Z|.KVZ|     10. |      |1.e+5|      |1.e-10|
4|Surface                |m to ref.|Z|.SRF|    1.E+4|      |9.e+9|      |-9.e+9|
5|Top                    |m to ref.|T|.TOP|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
6|Bottom                 |m to ref.|B|.BOT|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
7|Porosity                |-        |Z|.POR|     0.30|      |1.        |      |0.        |
8|Thickness              |m        |M|.THI|      1.  |      |1.e+3|      |0.01    |
9|River bottom elev.    |m to ref.|Z|.RBE|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
10|River bottom resist   |days    |Z|.RBR|    9.E+9|      |9.e+9|      |0.        |
11|Recharge               |m/d      |Z|.RCH|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
12|Sources                |m3/d     |V|.WEL|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
13|Layer type indicator  |-        |N|.RLV|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
14|Initial head           |m to ref.|.INI|      0.  |      |9.e+9|      |-9.e+9|
15|Fixed head indicator  |-        |N|.FIX|      1  |      |1        |      |-1       |
NO*NSCALE* VALUES (I=1, NSCALE)
1|10| 1.e-9| 1.00| 2.00| 3.00| 4.00| 5.00| 6.00| 7.00| 8.00| 9.00|
2|10| 1.e-9| 0.001| 0.01| 0.1 | 1.   | 10.  | 50.  | 100. | 1000.| 2500.|
3|10| 0.0001| 0.0002| 0.0003| 0.0005| 0.0008| 0.001| 0.01| 0.1  | 1.    | 10.   |
4|10| 0.0    | 0.001| 0.01| 0.1  | 1.   | 2.   | 5.   | 10.  | 50.   | 100.  |
5|10| 0.0    | 0.001| 0.01| 0.1  | 1.   | 10.  | 100. | 1000.| 10000.| 100000.|
6|10| 0.0    | 0.001| 0.01| 0.1  | 1.   | 10.  | 100. | 1000.| 10000.| 100000.|
7|10| 0.00   | 0.05 | 0.10| 0.15 | 0.20 | 0.25 | 0.30 | 0.40 | 0.50 | 0.60 |
8|10| 22.0   | 27.0 | 32.0 | 35.0 | 38.0 | 42.0 | 43.0 | 44.0 | 47.0 | 50.0 |
9|10| 0.0    | 0.001| 0.01| 0.1  | 1.   | 10.  | 100. | 1000.| 10000.| 100000.|
10|10| 1.e-9  | 0.001| 0.01| 0.1  | 1.   | 10.  | 100. | 1000.| 10000.| 100000.|
11|10| -1000.0| -100.0| -10.0| -1.0 | 0.   | 1.0  | 10.0 | 100.0| 1000.0| 10000.0|
12|10| -1000.0| -100.0| -10.0| -1.0 | 0.   | 1.0  | 10.0 | 100.0| 1000.0| 10000.0|
13| 9| -10.0  | -5.0  | -2.0 | -1.0 | 0.   | 1.0  | 2.0  | 5.0  | 10.   |
14|10| 0.0    | 1.00 | 2.00| 3.00| 4.00| 5.00| 6.00| 7.00| 8.00| 9.00|
15|03| -.9    | 0     | 1    |
    
```

Voorbeeld van dataconfiguratiebestand MODFLOW.VAR

no*	DESCRIPT(A20)	*UNIT(A10)	*T*	ext*	default val	max. value	min value	*
1	Computed head	m to ref.	N	.HEO	0.	9.e+9	-9.e+9	
2	Computed flow right	m3/d	N	.RFO	10.	9.e+9	-9.e+9	
3	Computed flow front	m3/d	N	.FFO	10.	9.e+9	-9.e+9	
4	Computed flow bottom	m3/d	N	.LFO	9.E+9	9.e+9	-9.e+9	
5	Computed Well flow	m3/d	N	.WLO	0.	9.e+9	-9.e+9	
6	Computed Storage	m3/d	N	.STO	0.	9.e+9	-9.e+9	
7	Computed Recharge	m3/d	N	.RCO	0.15	9.e+9	-9.e+9	
8	Computed Drainage	m3/d	N	.DRO	1.e-10	9.e+9	-9.e+9	
9	Computed River flow	m3/d	N	.RVO	0.	9.e+9	-9.e+9	
10	Computed Evapotransp	m3/d	N	.EVO	9.E+9	9.e+9	-9.e+9	
11	Computed Cst head fl	m3/d	N	.CHO	0.	9.e+9	-9.e+9	
12	Computed Gen head fl	m3/d	N	.GHO	0.	9.e+9	-9.e+9	
13	Computed drawdown	m	N	.DDO	0.	9.e+9	-9.e+9	
14	Observed - Computed	m	N	.RS1	0.	9.e+9	-9.e+9	
15	Reserve 2	-	N	.RS2	0	9.e+9	-9.e+9	
16	Velocity in X	m/d	N	.vxx	0.	9.e+9	-9.e+9	
17	Velocity in Y	m/d	N	.vyy	0.	9.e+9	-9.e+9	
18	Velocity in Z	m/d	N	.vzz	0.	9.e+9	-9.e+9	

NO*	NSCALE*	VALUES (I=1,	NSCALE)
1	10	-5.00	-4.00 -3.00 -2.00 -1.00 -0.00 1.00 2.00 3.00 4.00
2	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
3	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
4	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
5	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
6	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
7	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
8	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
9	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
10	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
11	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
12	10	-1000.0	-100.0 -10.0 -1.0 0. 1.0 10.0 100.0 1000.0 10000.0
13	10	55.5	65.0 75.0 80.0 82.5 85.00 87.5 90.0 92.5 95.0
14	10	55.5	65.0 75.0 80.0 82.5 85.00 87.5 90.0 92.5 95.0
15	10	55.5	65.0 75.0 80.0 82.5 85.00 87.5 90.0 92.5 95.0
16	10	-1.00	-0.50 -0.25 -0.10 -0.01 0.01 0.10 0.25 0.50 1.00
17	10	-1.00	-0.50 -0.25 -0.10 -0.01 0.01 0.10 0.25 0.50 1.00
18	10	-1.00	-0.50 -0.25 -0.10 -0.01 0.01 0.10 0.25 0.50 1.00

Nota Bene Het is mogelijk om de defaultinstellingen voor een bepaald model te wijzigen. Daartoe moeten kopieën gemaakt worden van de bestanden MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR met dezelfde extensie, maar met de naam van het model, bijvoorbeeld EXAMPLE.PAR en EXAMPLE.VAR. Meestal is dit handig, omdat de waarden van bijvoorbeeld de berekende stijghoogten van model tot model kunnen verschillen.

Bijlage II Blokspecificatie van generieke geohydrologische data

Het toekennen van parameterwaarden aan roostercellen op basis van beschikbare generieke informatie gebeurt in MODGRID door het activeren van de submenukeuze **Import Generic Data Set** uit hoofdmenukeuze **FILES**.

Als voor een geohydrologisch gegeven de beschikbare generieke informatie vertaald moet worden in waarden voor modelparameters per roostercel zoekt MODGRID naar een bestand met een extensie die uniek is voor die parameter (zie de beschrijving van het dataconfiguratiebestand MODGRID.PAR in bijlage I)

Bijvoorbeeld: Als het informatie betreft over de waarde van de initiële grondwaterstand (parameter nummer 14) voor een model genaamd EXAMPLE, zoekt MODGRID naar generieke informatie in het bestand EXAMPLE.INI.

Specificatie van generieke data vindt met MODGRID plaats per blokvormig deelgebied. De beschrijving van de informatie over het verloop van de waarde voor de betreffende parameter binnen zo'n gebied bestaat uit een groepje regels. De eerste regel dient ter beschrijving in woorden van het type informatie. Alleen de eerste letter van deze regel heeft voor MODGRID een functie bij de herkenning van het type data.

Aanduiding van het type generieke informatie

Generieke gegevens kunnen van het volgende type zijn:

Type informatie	Herkenningss- karakter
1 Constant	C
2 Lineair te interpoleren	I
3 SURFER GRID bestanden	S
4 GIS-bestanden in BNA-formaat	G
5 Polder GIS-bestanden in BNA-formaat	P
6 Geïnterpoleerd na Thiessen-triangulatie	T
7 Niet-geïnterpoleerde puntwaarden	W

Nota Bene: Een 'E' of 'e' op de eerste positie van de kopregel interpreteert MODGRID als het einde van het bestand. Dit kan handig zijn wanneer slechts een deel van de blokken (overnieuw) verwerkt hoeft te worden.

Aanduiding van het geldigheidsvenster

De tweede regel in een groepje regels geeft de begrenzing aan van het blokvormige gebied waarbinnen de te specificeren informatie geldig is. De regel bestaat uit zes getallen, die achtereenvolgens de minimale X, Y en Z-waarde voorstellen gevolgd door de corresponderende maximale waarden. Deze extreme coördinaten vormen dus een soort drie-dimensionaal 'venster'. MODGRID maakt er melding van als dit venster in het geheel buiten de begrenzing van het gemodelleerde gebied valt.

Aanduiding van de coördinatentransformatie

De derde regel in een identificatieblok bestaat uit 8 getallen.

De eerste 4 getallen zijn vermenigvuldigingsfactoren, die worden toegepast op de X, Y, Z-coördinaten en de parameterwaarden achtereenvolgens.

Als de lokatie van beschikbare geobserveerde waarden is gegeven in kilometers, dan dient voor de coördinaten X en Y een vermenigvuldigingsfactor 0.001 gespecificeerd te worden om te komen tot de door MODGRID gebruikte lengte-eenheid meters.

Als de geobserveerde waarde (voor bijvoorbeeld de doorlaatfactor) is uitgedrukt in cm/s, moet een vermenigvuldigingsfactor worden toegepast van 0.0011754 (= 100/86400) om te komen tot de door MODGRID gebruikte eenheid van m/d.

De laatste 4 getallen hebben betrekking op transformatie van de coördinaten. Soms zijn de lokaties van de beschikbare waarnemingen uitgedrukt ten opzichte van een assenstelsel, dat niet overeenstemt met het in MODGRID gebruikte systeem van wereldcoördinaten. Om de systemen op elkaar te passen wordt het volgende opgegeven:

- een vector waarover de waarnemingslokaties getransleerd worden (achtereenvolgens de X, Y en Z-component van deze vector)
- een hoek (in radialen), waarover de waarnemingslokaties geroteerd worden. De rotatie wordt uitgevoerd voor de transformatie, dus ten opzichte van de oorsprong van het assenstelsel waarin de coördinaten van de waarnemingspunten gegeven zijn.

De volgende regel (afwezig wanneer het blokken met Constante waarden of lineair te interpoleren waarden betreft) dient om aan te geven op welk projectievlak de generieke gegevens betrekking hebben. Er dient een code van twee letters opgegeven te worden, te kiezen uit XY, XZ en YZ. De eerste letter geeft aan op welke dimensie de eerste coördinaat van de waarnemingslokaties betrekking heeft, en de tweede letter idem voor de tweede coördinaat.

Bijvoorbeeld: Als de aanduiding in regel 4 'XZ' is, dan wordt een bestand met lokatie en waarde voor beschikbare puntwaarnemingen van de doorlatendheid geïnterpreteerd als betrekking hebbend op een verticale dwarsdoorsnede loodrecht op de Y-as. Het opgegeven venster (regel 2 van het identificatieblok) bepaalt dan, voor welke aaneengesloten dwarsdoorsneden de waarden geldig zijn.

Nota Bene Een dwarsdoorsnede van het model wordt geacht binnen het venster te liggen, wanneer de zwaartepunten van de betreffende cellen erbinnen vallen. De positie van de zwaartepunten van cellen per modeldoorsnede leidt MODGRID af uit informatie in het dimensie-bestand met extensie '.DIM.', dus bijvoorbeeld EXAMPLE.DIM voor model EXAMPLE.

Nota Bene De positie van de roostercursor en het aangezichtsvlak op het moment van aanroepen van de overlay-operatie zijn niet van invloed op het resultaat.

Aanduiding van de databestanden voor een blok generieke informatie

Als laatste dient voor gegevens van het type 'G', 'P', 'S', 'T' en 'W' één of meer bestandsnamen opgegeven te worden. Voor het type 'T' betreft dit 2 bestanden, te weten:

- 1 een bestand met de begrenzing van het in polygonen op te delen gebied (coördinatenparen gevolgd door een waarneming)
- 2 een bestand met de binnen dit gebied gelegen waarnemingspunten, met voor elk punt een record bestaande uit een coördinatenpaar gevolgd door een waarneming.

De te gebruiken bestandsnamen dienen aan de DOS-conventies te voldoen; bovendien moeten zij verwijzen naar daadwerkelijk aanwezige bestanden. Als dit niet het geval is, genereert MODGRID een foutmelding.

Nota Bene: Het verdient zeer sterke aanbeveling altijd de volledige bestandsaanduiding te gebruiken, dus inclusief driveletter en pad!

SURFER bestanden (type S) hebben de volgende structuur:

Rec	Inhoud	Betekenis
No	Word	
1	Word	4-letterige code. Het derde karakter geeft aan of het bestand een ASCII- (A) of Binair (B) formaat heeft.
2	Np, Nq	(Aantal punten in de P-richting en in de Q-richting)
3	Pmin, Pmax	(Extreme coördinaten in P-richting)
4	Qmin, Qmax	(Extreme coördinaten in Q-richting)
5	Valmin, Valmax	(Extreme waarden in interpolatieveld)
6	((Val(ip, jq), ip=1, np), iq=1, nq)	Geinterpoleerde waarden voor de achtereenvolgende punten van het rooster

De punten van het interpolatierooster zijn gekozen met een regelmatige afstand, te berekenen uit:

$$\text{Step}_p = (\text{Pmax} - \text{Pmin}) / (\text{Np} - 1) \quad \text{en}$$

$$\text{Step}_q = (\text{Qmax} - \text{Qmin}) / (\text{Nq} - 1).$$

Voor het maken van een overlay met een MODFLOW-rooster worden de SURFER-punten opgevat als de zwaartepunten van rechthoeken met afmetingen Step_p en Step_q in de P- en Q-richting respectievelijk. De begrenzingen van het aldus gedefinieerde gebied worden gevormd door de lijnen

$$\begin{aligned} P1 &= \text{Pmin} - \text{Step}_p/2 \text{ ter linkerzijde} \\ P2 &= \text{Pmax} + \text{Step}_p/2 \text{ ter rechterzijde} \\ Q1 &= \text{Qmin} - \text{Step}_q/2 \text{ aan de onderzijde} \\ Q2 &= \text{Qmax} + \text{Step}_q/2 \text{ aan de bovenzijde.} \end{aligned}$$

Een volledige 1-op-1 overlap wordt dus verkregen door:

- 1 P1 en Q1 voor het MODFLOW rooster als oorsprong te hanteren;
- 2 In de P-richting Nstep_p kolommen te definiëren met een uniforme breedte Step_p ;

3 In de Q-richting Nstepq kolommen te definiëren met een uniforme breedte Stepq.

Als de begrenzingen van het MODFLOW-rooster binnen de begrenzingen van het interpolatieveld in het SURFER-bestand vallen is de waarde van de betreffende parameter gedefinieerd voor het gehele MODFLOW-rooster. Voor MODFLOW-cellen die geheel buiten het door SURFER gedekte gebied vallen blijft de oorspronkelijk bepaalde waarde gelden. Voor MODFLOW-cellen die deels binnen en deels buiten het door SURFER gedekte gebied vallen wordt de parameterwaarde bepaald als een naar oppervlakte gewogen gemiddelde.

SURFER interpolatievelden worden traditioneel gebruikt voor in het horizontale vlak verdeelde gegevens. MODGRID is echter ook in staat om SURFER-data op te vatten als geldend voor verticale doorsneden in de XZ of YZ richting.

GIS-bestanden (type G) en Polderbestanden (type P) in BNA formaat hebben de volgende structuur

Vectorgegevens hebben steeds de vorm van een verzameling gesloten, zichzelf niet snijdende polygonen, waarbinnen een attribuut een constante waarde heeft. Als dergelijke zogenaamde 'coverages' (een deel van) het gebied bestrijken waarvoor een modelrooster gemaakt is, kan MODGRID hieruit automatisch parameterwaarden voor de overlapte cellen bepalen. Daartoe moet de coverage in een zogenaamd BNA-formaat beschikbaar zijn. ARC/INFO en ATLAS*GIS beschikken over uitvoermodules om coverages in .BNA-formaat te exporteren.

Per polygoon met N hoekpunten dienen in het BNA-bestand N+1 opeenvolgende records gespecificeerd te zijn. Het eerste record bevat 2 character strings, afgesloten met dubbele aanhalingstekens ("), en een integer getal.

De strings beschrijven achtereenvolgens de identificatie van de polygoon en de waarde van de bijbehorende attribuut. Het integer getal geeft het aantal hoekpunten van de polygoon (N) aan. De N volgende records bevatten steeds een coördinatenpaar van de opeenvolgende hoekpunten van de polygoon.

Voorbeeld:

Recordnummer	Inhoud
1	"1", "200 ", 6
2	120. 50.
3	130. 70.
4	150. 90.
5	130. 80.
6	120. 60.
7	110. 55.

Bij het exporteren van vectordata uit een GIS-systeem in BNA-formaat dient de attribuutwaarde voor het coderen van de betreffende MODGRID parameterwaarde. Een beperking van het BNA-formaat is, dat alleen integer getallen in de string kunnen staan. Door de vermenigvuldigingsfactor voor parameterwaarden in de blokspecificatie kan dit probleem omzeild worden.

De specificatie van een blok voor een Vector-GIS bestand of een Polderbestand is identiek aan die van SURFER data, met dit verschil dat het eerste record moet beginnen met een G van GIS data of een P an Polderdata. Hieraan herkent MODGRID dat het navolgende blok data bevat voor vectordata in BNA-formaat.

Nota Bene Het BNA-formaat bevat een codering voor polygonen met interne grenzen. Zonder probleem kunnen polygonen 'met een gat erin' afgehandeld worden. Bij het verwerken van bijvoorbeeld een digitale waterstaatskaart is dit zeer handig.

Bestandsstructuur voor te trianguleren sets puntwaarnemingen (Type T)

Individuele waarnemingen die met Thiessen-triangulatie tot een vlakvullende beschrijving van het verloop van een parameter dienen, moeten in 2 bestanden gespecificeerd worden:

- 1 Een bestand met een beschrijving van de grenspunten van het gebied ; en
- 2 Een bestand met de eigenlijke waarnemingspunten.

Beide bestanden hebben dezelfde structuur, te weten

- een header-record voor beschrijving in woorden van de dataset;
- een record met een aanduiding van het aantal navolgende datarecords; en
- (tenminste) evenveel datarecords als opgegeven in het 2^e record, waarin per record 3 getallen staan, te weten: X-coördinaat, Y-coördinaat en (waargenomen) parameterwaarde.

Nota Bene Het bestand met grenspunten bevat ook parameterwaarden, zodat aan de hoekpunten van het gebied een waarde toegekend kan worden en geen extrapolatie nodig is. Als geen waarde bekend is, kan -999.9 gespecificeerd worden. MODGRID kent in de triangulatieprocedure dan aan het betreffende hoekpunt de waarde toe die is waargenomen in het dichtstbijzijnde station. De achtereenvolgende grenspunten dienen een convexe polygoon te beschrijven. MODGRID bevat momenteel nog geen test om te bepalen of een waarnemingspunt binnen de grenspolygoon ligt. Als dit niet het geval is, zijn de resultaten van de Thiessentriangulatiemethode onvoorspelbaar.

De specificatie van een blok voor een set Thiessentriangulatie bestanden is identiek aan die van SURFER data, met deze verschillen dat:

- 1 het eerste record moet beginnen met een T van Thiessen Triangulatie data. Hieraan herkent MODGRID dat het navolgende blok data bevat voor Thiessen-triangulatie.
- 2 In plaats van 1 bestandsnaam moeten er 2 gespecificeerd worden, te weten eerst het bestand met grenspunten en dan het bestand met waarnemingspunten.

Bestandsstructuur voor sets individuele puntwaarden (Type W)

MODGRID kent nog een wijze van specificatie van generieke waarden, ontwikkeld met het oog op putonttrekkingen, vandaar de naam Well type data. Een bestand met well data heeft de volgende structuur:

- een header record voor beschrijving in woorden van de dataset;
- een verzameling datarecords, waarop 4 getallen staan, te weten:
X-, Y-, Z-coördinaat van het waarnemingspunt en tenslotte de waargenomen waarde (bij putten: het debiet).

Bij de vertaling in termen van het modelrooster wordt de roostercel bepaald waarin de put gelegen is, waarna die cel voor de betreffende parameter deze waarde krijgt toegekend. Valt de plaats van de onttrekking samen met 1 of meer roosterlijnen, dan vindt verdeling plaats evenredig met de oppervlakte of zelfs het volume van de betreffende cellen.

Nota Bene Bij het toewijzen van een onttrekking aan een bepaalde modellaag maakt MODGRID gebruik van de informatie in het .DIM bestand over top en onderkant van modellagen. Dit zijn uniforme referentiewaarden; het is in principe mogelijk om per cel top en onderkant van iedere laag te specificeren en van deze informatie gebruik te maken bij de toewijzing. Thans is deze mogelijkheid nog niet geïmplementeerd binnen MODGRID.

De specificatie van een blok voor een bestand met individuele puntwaarden is identiek aan die van SURFER data, met dit verschil dat het eerste record moet beginnen met een W van WELL TYPE DATA. Hieraan herkent MODGRID dat het navolgende blok data bevat voor puntdata in het betreffende formaat. Het record met de vlakaanduiding is in dit geval redundant, maar het is met het oog op de eenvormigheid gehandhaafd.

Specificatie van een constante waarde voor het opgegeven venster

Deze wijze van specificatie vergt na de regel voor coördinantentransformatie nog 1 regel met de constante waarde van de betreffende parameter. Op deze waarde wordt nog de vermenigvuldigingsfactor uit de voorgaande regel toegepast. Er zijn geen verdere regels nodig om dit type generieke datablok verder te specificeren.

Specificatie van een lineair interpolatieblok voor het opgegeven venster

Deze wijze van specificatie vergt na de (redundante) regel voor coördinantentransformatie nog 1 regel met 8 waarden van de betreffende parameter voor de hoekpunten van het opgegeven venster. In onderstaande tabel is aangegeven in welke volgorde de getallen opgegeven moeten worden.

Tabel II Volgorde voor de aanduiding van parameterwaarden op de hoekpunten van een blok

VAL	X		Y		Z	
	min	max	min	max	min	max
1	+		+		+	
2	+			+	+	
3		+	+		+	
4		+		+	+	
5	+		+			+
6	+			+		+
7		+	+			+
8		+		+		+

Op deze waarden wordt nog de vermenigvuldigingsfactor uit de voorgaande regel toegepast. Er zijn geen verdere regels nodig om dit type generieke datablok nader te specificeren.

Bijlage III Configuratie van MODGRID

Een aantal instellingen voor MODGRID wordt van buiten het programma geregeld met het configuratiebestand MODGRID.CFG. Hierin staan de volgende groepen dataregels (elke dataregel steeds voorafgegaan door een commentaarregel:

Groep I: HALO Professional Device Drivers

- De bestandsaanduiding (inclusief drive en pad) voor de zogenaamde HALO-Kernel, waarin de grafische schermaansturing geregeld wordt.
- De bestandsaanduiding voor de Graphical Device Driver. Dit bestand is afhankelijk van het type scherm (EGA, VGA etc.).
- De bestandsaanduiding voor de Locator Device Driver, waarmee de muisbesturing geregeld wordt door HALO Professional.
- De bestandsaanduiding voor de Printer Device Driver, waarmee de aansturing van de graphische printer wordt geregeld door HALO Professional.

Groep II: Default dataconfiguratie

- De aanduiding van het pad waar de bestanden MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR gezocht moeten worden. Hierin zijn defaults, minimaal en maximaal toelaatbare warden en zijn schaalindelingen voor resp. invoerparameters en uitvoervariabelen van MODFLOW weergegeven.

Zoals aangegeven in het gedeelte over veranderen van schaalwaarden kan per rekengeval een aparte set dataconfiguratiebestanden gebruikt worden. Deze kunnen gemaakt worden door MODGRID.PAR en MODFLOW.VAR te kopiëren naar de betreffende werkdirectory en de vereiste aanpassingen met een teksteditor uit te voeren. Zie voor het formaat van de records in de dataconfiguratiebestanden bijlage I.

Groep III: Kleurcodes voor diverse onderdelen van de schermopbouw

- Kleurindices voor het VGA-palet (16 kleuren uit een reeks van 64).
- Kleurindicatoren voor diverse soorten tekst, achtergrond en hulplijnen. Deze indicatoren verwijzen niet rechtstreeks naar het VGA-palet, maar naar de kleurindices die op de voorgaande dataregel zijn gespecificeerd

Groep IV: Scherm Layout informatie

- Aanduiding van de plaats en afmetingen van het deel van het scherm waar de contourenkaartjes getekend zullen worden. De totale breedte van het scherm wordt door MODGRID verdeeld in een linker marge, een tekenvenster en een rechtermarge, in de verhouding LMARGE : 1 : RMARGE. Voor de hoogte van het scherm geldt analogoog een verhouding (van beneden naar boven) van BMARGE : 1 : TMARGE. De vereiste 4 getallen op deze regel moeten gespecificeerd worden in de volgorde BMARGE, TMARGE, LMARGE, RMARGE.

Nota Bene: De getallen BMARGE, TMARGE, LMARGE en RMARGE kunnen niet naar willekeur gewijzigd worden. Het aanpassen kan leiden tot overlap tussen tekstvensters op het scherm en het grafische venster.

Groep V: Compiler informatie

- Aanduiding van type compiler met een getal. (1=Microsoft Fortran, 2=Lahey Fortran). Deze informatie wordt door MODGRID gebruikt voor het correct lezen en schrijven van binaire bestanden, zodat de resultaten tussen versies van MODGRID voor verschillende FORTRAN compilers uitwisselbaar zijn.

Groep VI: Informatie om in 3D-perspectief een cel met zijn buurcellen te kunnen tekenen.

Deze informatie omvat 3 regels.

De eerste regel betreft het tekenen van een individueel blok met gekleurde zijvlakken op het scherm. De getallen geven verhoudingen aan van de te tekenen zijden. De eerste 2 getallen (idx1, idy2) geven aan hoe het punt linksvooronder bereikt wordt vanuit het referentiepunt linksachteronder, uitgedrukt in bewegingen in de X- en Y-richting achtereenvolgens. De volgende 2 getallen (idx2, idy2) geven aan hoe van linksvooronder rechtsvooronder bereikt wordt. De daaropvolgende 2 getallen (idx3, idy3) geven aan hoe rechtsachteronder bereikt wordt (uit symmetrie-overwegingen gelijk aan het tegengestelde van (idx1, idy1)). Dan volgt een getal (idy0) om aan te geven hoe hoog het blok moet worden. Het laatste getal op de eerste regel (endscale) dient om de lengte aan te geven van de coördinaatassen, die aan de buitenzijde uit de vlakken steken.

De tweede regel geeft in VGA pixelcoördinaten voor de in totaal 7 te tekenen kubussen aan, welke X-positie het referentiepunt inneemt. De volgorde is:

- 1-centrale kubus
- 2-rechterbuur
- 3-linkerbuur
- 4-bovenbuur
- 5-benedenbuur
- 6-voorbuur
- 7-achterbuur

De derde regel geeft in VGA pixelcoördinaten voor de in totaal zeven te tekenen kubussen aan, welke Y-positie het referentiepunt inneemt. De volgorde is hetzelfde als bij de voorgaande regel.

Nota Bene: Bij pixelcoördinaten neemt de Y-coördinaat toe in neerwaartse richting!

Groep VII: Aspect ratio van het scherm

Dit getal geeft de lengte/breedte verhouding aan van pixels op het scherm. Voor de IBM-EGA display (waarvoor MODGRIG geconfigureerd is) bedraagt dit getal 0.75. HALO Professional routines vertalen wereldcoördinaten in pixelcoördinaten. Een instructie voor het tekenen van een lijnstuk van het punt ($x=6m$, $y=7m$) tot het punt ($x=10m$, $y=3m$) wordt vertaald in termen van pixels (teken een lijn vanaf het beginpunt 40 pixels naar rechts en 40 pixels naar beneden). Daarbij wordt er van uitgegaan, dat pixels in beide richtingen dezelfde afmeting hebben, hetgeen niet het geval is. De Aspect Ratio geeft de werkelijke verhouding aan. Met dit getal kan een correctie gemaakt worden, zodat een vierkant ook daadwerkelijk vierkant overkomt op het scherm. Zie verder de HALO Professional manual voor meer informatie.

Groep VIII: Aanduiding van de positie voor legenda titel en legenda (in integer tekstcoördinaten)

Deze getallen geven de startpositie aan voor het schrijven van legendatitel en legenda. Verandering van de standaardwaarden kunnen tot gevolg hebben, dat het grafische venster overschreven wordt.

Nota Bene: Integer tekstcoördinaten worden opgegeven in de volgorde (Y, X). Y loopt daarbij op van boven naar beneden, en X van links naar rechts.

Groep IX: Vector Proportie informatie

- Aanduiding in de vorm van verhoudingsgetallen van vorm en grootte van vectorpijlen. Het eerste getal geeft de verhouding aan tussen de afmeting van het grafische venster en de maximale snelheidsvector in de getoonde dwarsdoorsnede. Het tweede getal geeft de maximale breedte van de pijlpunt aan (als fractie van de lengte van de pijl). Het derde getal geeft aan, op welk deel van de pijl-lengte de kop begint (eveneens een fractie).

Groep IX: Instellingen voor gevoeligheid van de muis bij bewegen van de roostercursor en door de scroll-menu's.

De eerste 2 getallen (sensnavg en xtoynavg) hebben betrekking op de gevoeligheid van de roostercursor voor beweging van de muis. Sensnavg geeft een versterkingsfactor aan, waarmee een beweging van de muis (uitgedrukt in wereldcoördinaten) wordt vermenigvuldigd. Hoe groter dit getal, hoe eerder de drempelwaarde wordt overschreden, zodat de roostercursor verplaatst zal worden. Xtoynavg geeft de verhouding in gevoeligheid aan tussen de X- en de Y-richting. Hoe groter dit getal, hoe groter de gevoeligheid voor beweging in de Y-richting vergeleken met de X-richting.

De volgende 2 getallen hebben een vergelijkbare functie, maar dan voor het bewegen van de menucursor. Om te voorkomen dat kleine zijwaartse bewegingen een verschuiving naar een ander submenu veroorzaken moet dit getal bij voorkeur groter dan 1 zijn.

Groep X: Aantal stappen voor het tekenen van isolijnen

Dit getal is van belang bij het tekenen van isolijnen. Hoe groter het getal, hoe vloeiender de contouren. De minimale waarde is 1, maar deze waarde is af te raden omdat de resulterende contouren zeer hoekig zullen zijn. Een te grote waarde echter zal de snelheid waarmee de contouren bepaald worden sterk beperken.

Groep XI: Tekst parameters

Deze 2 regels geven lokaties aan van diverse tekstelementen op het scherm, en de afmetingen van de letters. De waarden zijn gekoppeld aan het type scherm dat gebruikt wordt. De instellingen

in het meegeleverde standaard configuratiebestand MODGRID.CFG hebben betrekking op de VGA-schermdefinitie.

Groep XII: HALO Professional parameter voor scherminitialisatie

Afhankelijk van de opgegeven screen driver moet het scherm met een andere code geïnitieerd worden.

Voorbeeld van een MODGRID configuratiebestand (vereiste naam: MODGRID.CFG)

```

* HALO PROFESSIONAL GRAPHICS KERNEL
..\..\haloprof\ahdlfpl.krn
* HALO PROFESSIONAL GRAPHICS DISPLAY SCREEN DRIVER
..\..\haloprof\ahdibme.dsp
* HALO PROFESSIONAL GRAPHICS PRINTER DRIVER
..\..\haloprof\ahdbw8.prt
* HALO PROFESSIONAL LOCATOR DEVICE DRIVER
..\..\haloprof\ahdmou.loc
* Path for files MODGRID.PAR and MODFLOW.VAR with default parameter settings
..\CONFIG\
* HALO PROFESSIONAL IBM VGA COLOR PALETTE
0 49 57 11 59 35 51 58 62 46 60 12 0 7 57 63
* color indices for foreground and background
13 12
* color indices for foreground and background of titles and status
13 12
* color index for grid lines
13
* color index for selected cells
7
* color index for map overlay
15
* color index for flowpaths
11
* color index for balance area boundaries
7
* boundary margins for screen picture (bottom top left right)
0.26 0.2 0.15 0.15
* switch for compiler type (1=Microsoft Fortran, 2=Lahey Fortran)
2
* INSTRUCTION DATA FOR DRAWING SINGLE SOLID BOX ON SCREEN
15, 15, 30, 0, -15, -15, 30, .4
* locations for starting points of drawing in X-direction
150 250 50 150 150 200 100
* locations for starting points of drawing in Y-direction
80 80 80 35 125 115 45
* Aspect ratio of screen to make 1:1 drawings
0.75 / 0.45 /
* Text positions for legend title (x, y) and legend (x, y)
1 3 22 73
• Vector Plot Scaling Factors (Vector length-window, tip length-vector length / tip width to vector length)
0.2 0.3 0.7
* mouse sensitivity and x to y ratio for cursor navigation mode and menu mode
0.001 1. 0.0001 20.
* number of steps for drawing isoline contours
4
* Various text bar positions (ibarcoor, ibarstat, ibartit, ibarmenu, ibargrid, ibar2)
40 42 1 1 9 44
* Standard HALO Professional FAST TEXT size parameters (Current settings = VGA)
1 8
* Graphics Mode code for screen initialization
2

```


Bijlage IV Formaat van bestanden voor de COMPARE module in MODGRID

Na de eerste commentaarregel volgen 2 regels waarop de zogenaamde Compare Dimensions moeten worden aangegeven. De eerste regel heeft betrekking op de horizontale as van het scherm (van links naar rechts op het scherm) en de tweede op de verticale as (van beneden naar boven op het scherm). De volgende Compare Dimensions zijn mogelijk (hoofdletters verplicht !):

PARAMETER
 TIMESTEP
 SCENARIO
 CROSS-SECTION

Dan volgt de informatie voor de eerste Compare Dimension:

Een commentaarrecord, gevolgd door een record met daarop het aantal windows NWIN(1) dat horizontaal naast elkaar (in de X-richting) getoond moet worden. Daarop volgen NWIN(1) records met een aanduiding van wat er in ieder window getoond moet worden.

Bij Compare Dimension

hoort omschrijving

PARAMETER
 TIMESTEP
 SCENARIO

rangnummer uit data-configuratiebestanden
 rangnummer
 bestandsnaam (zonder extensie)

Nota Bene: Het verdient zeer sterke aanbeveling altijd de volledige bestandsaanduiding te gebruiken, dus inclusief driveletter en pad!

CROSS-SECTION

Vlakaanduiding (XY, XZ of YZ) gevolgd door een regel met 5 getallen. Het eerste getal geeft aan om welke laag het gaat. Het tweede en derde de minimale en de maximale roostercoördinaat in de eerste coördinaatrichting, en het vierde en het vijfde de minimale en de maximale roostercoördinaat in de tweede coördinaatrichting. Voorbeeld: voor een bovenaanzicht moet de vlakaanduiding XY zijn. De onderste laag heeft rangnummer 1.

Dan volgt de informatie voor de tweede Compare Dimension, op een analoge manier.

Tot slot moet, na een commentaarrecord, nog een record met vier getallen tussen 0 en 1 opgegeven worden. Deze getallen dienen om de onderlinge afstand tussen de vensters te regelen. Het zijn achtereenvolgens de linker-, rechter-, onder- en bovenmarge. De getallen zijn uitgedrukt ten opzichte van een afmeting 1 van het plaatje. Een linker marge van 0.5 en een rechter marge van 0.5 geeft dus een afstand tussen vensters die even groot is als de vensters zelf.

- Nota Bene*
- 1 *Het maximale aantal vensters in de X-richting en in de Y-richting is 5.*
 - 2 *Het is mogelijk om 2 maal dezelfde Compare Dimension op te geven. In dat geval is de betekenis van de informatie voor het eerste blok als bovenbeschreven. In de records voor de tweede Compare Dimension moet het totale aantal vensters worden opgegeven. Daarna moet dan voor het aantal resterende vensters de omschrijving gegeven worden. Bijvoorbeeld: als er 8 parameters getoond moeten worden, met steeds 3 naast elkaar in de X-richting, dan moet voor blok 1 het getal 3 opgegeven worden, en de 3 bijbehorende rangnummers. Voor blok 2 moet dan het totale aantal (8) opgegeven worden en de rangnummers voor de resterende 5 parameters*

** Compare dimensions:*

PARAMETER

PARAMETER

** Number of parameters and subsequent sequence numbers:*

3

12

13

14

** Total number of parameters and remaining sequence numbers*

8

15

16

17

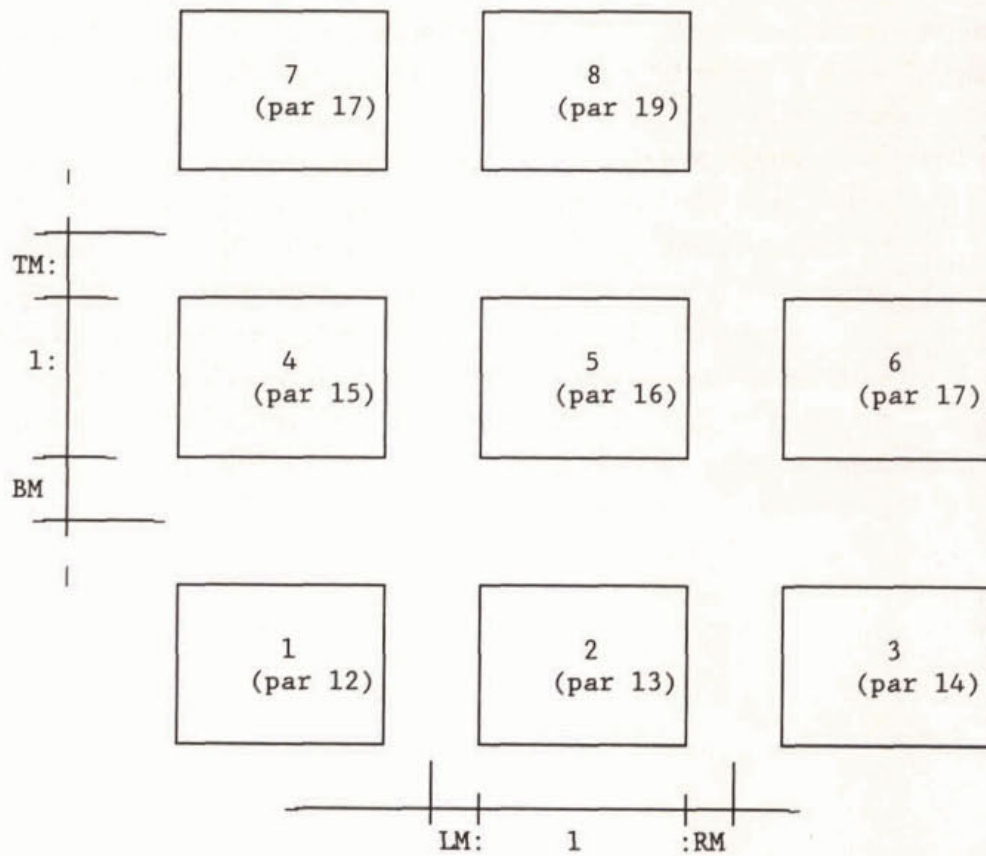
18

19

** Margins for display windows*

0.05 0.05 0.05 0.05

De opbouw van het resulterende scherm is weergegeven in onderstaande figuur (waarin tevens de betekenis van de linker-, rechter-, onder- en bovenmarges LM, RM, BM en RM is geïllustreerd).



Bijlage V Default waarden voor de MODFLOW sturingsparameters

Met submenukeuze 1.6 (Generate MODFLOW Input) van het FILES menu wordt een set invoerbestanden aangemaakt voor een MODFLOW simulatie. In principe worden alle benodigde bestanden door MODGRID aangemaakt, dus ook de bestanden met sturingsinformatie. Voor een uitgebreide beschrijving van de betekenis van deze variabelen wordt verwezen naar de MODFLOW manual.

Nota Bene Aan de meeste MODFLOW-invoerbestanden zijn enkele parameters toegevoegd, aan de hand waarvan met de door WL aangepaste versie van MODFLOW de produktie van modeluitvoer gestuurd kan worden. Doorgaans hebben deze toevoegingen geen invloed op de werking van standaard MODFLOW. Een uitzondering geldt echter voor het .SIP invoer bestand, betreffende parameters die horen bij het oplosschema de Strongly Implicit Procedure. Zie de beschrijving van de WL-wijzigingen aan MODFLOW voor de vereiste structuur van dit invoerbestand en de enigzins gewijzigde betekenis van enkele van de betreffende parameters.

Bijlage VI Interpolatieprocedure bij verfijning van het rooster

Bij het onderverdelen van roostercellen doet zich een probleem voor als er reeds een parameterwaarde is toegekend aan iedere roostercel. Door het onderverdelen wordt een aantal cellen namelijk opgedeeld in meerder kleinere cellen, waarvoor ook weer parameterwaarden vereist zijn.

Idealiter worden de parameterwaarden voor de cellen van het verfijnde rooster verkregen door het opnieuw produceren van een overlay tussen de basisgegevens in generiek formaat en het modelrooster. Voor sommige parameters is in veel gevallen echter geen generieke informatie voorhanden. In dat geval krijgen alle cellen de defaultwaarde voor de betreffende parameter bij de overlayprocedure. Vaak worden er daarna echter nog 'met de hand' (d.w.z. met het selectiemechanisme dat in MODGRID beschikbaar is) wijzigingen aangebracht, die niet verloren mogen gaan. Welke interpolatiemethode daarbij gebruikt moet worden, is sterk afhankelijk van het type parameter.

Om maximale flexibiliteit te bieden kan in MODGRID door middel van een éénletterige code per parameter bepaald worden op welke wijze de interpolatie voor een parameterwaarde wordt bepaald voor nieuwe cellen die ontstaan bij verfijning van het rooster. Deze code wordt gespecificeerd in het dataconfiguratiebestand MODGRID.PAR (of de door de gebruiker aangemaakte modelspecifieke versie daarvan). Zie voor een volledige beschrijving van dit bestand bijlage I. Thans zijn de volgende wijzen van interpolatie via een codering te activeren:

- 'N': No interpolation, dat wil zeggen, dat alle cellen die in het nieuwe rooster de plaats innemen van een cel uit het oude rooster, dezelfde parameterwaarde krijgen als die oude cel
- 'V': Volumetric flux, dat wil zeggen dat bij onderverdeling de betreffende cellen gedeeld worden door het oppervlak dat zij beslaan in de getoonde dwarsdoorsnede. Verder vindt geen interpolatie plaats en is de procedure van het toekennen van parameterwaarden dezelfde als onder 'N'. Na afloop van de interpolatie wordt de waarde voor elke cel weer vermenigvuldigd met het betreffende oppervlak.

Nota Bene: Deze optie is speciaal toegevoegd voor de 'parameter' onttrekkingsdebiet (eigenlijk een randvoorwaarde). Het totaal onttrokken debiet mag immers niet veranderen, en bovendien mag het niet uitgesmeerd worden over een groter gebied dan het gebied dat ingenomen wordt door de oorspronkelijk cel. De beschreven interpolatiemethode leidt tot dit resultaat:

- 'X': Interpoleer in de Y- en de Z-richting, maar niet in de X-richting
- 'Y': Interpoleer in de X- en de Z-richting, maar niet in de Y-richting
- 'Z': Interpoleer in de X- en de Y-richting, maar niet in de Z-richting
- 'P': Interpoleer alleen in de X-richting
- 'Q': Interpoleer alleen in de Y-richting
- 'R': Interpoleer alleen in de Z-richting
- 'K': Evenredig onderverdelen in de X-richting.
- 'L': Evenredig onderverdelen in de Y-richting
- 'M': Evenredig onderverdelen in de Z-richting. Deze optie is van belang bij bijvoorbeeld laagdiktes: de dikte die aan een laag is toegekend in het oude rooster is niet geldig voor alle laagjes waarin hij wordt opgedeeld. Bij een onderverdeling in N laagjes wordt aan iedere laag 1/N deel van de oorspronkelijk parameterwaarde toegekend.
- 'A': Evenredig onderverdelen in de Y- en de Z-richting.
- 'B': Evenredig onderverdelen in de X- en de Z-richting
- 'C': Evenredig onderverdelen in de X- en de Y-richting.

Elke andere eenletterige code wordt geïnterpreteerd als: trilineair interpoleren met de roosterafstanden (afstanden tussen de zwaartepunten van de cellen) als weegfactor.

Nota Bene Voor de parameters *Top* en *Bottom* zou ook een speciale interpolatie gecodeerd moeten worden, om te bereiken dat bij verticale onderverdeling van de datamatrices voor deze parameters de nieuw tussengevoegde lagen een correcte waarde toegewezen krijgen in de interpolatie. Thans is de gebruiker nog zelf verantwoordelijk voor het aanpassen van de waarden voor deze parameters voor de nieuwe cellen na verfijning.

Nota Bene Een parameter waarvoor typisch 'No Interpolation' gekozen zou moeten worden is *Fixed Head Indicator*. Vaak worden aan de modelranden vaste potentialen opgelegd, hetgeen in MODFLOW wordt bereikt door het specificeren van een negatieve waarde van deze parameter voor de betreffende cellen. Bij onderverdeling van dergelijke cellen ter verfijning van het rooster kan als ongewenst nevenverschijnsel groei van het aantal cellen met een vaste potentiaal optreden. Er is geen eenvoudig algoritme denkbaar om dit verschijnsel te voorkomen. De gebruiker blijft dus zelf verantwoordelijk voor een gedegen controle van het interpolatieresultaat na een verfijning van het rooster!

Bijlage VII Structuur en formaat van kaartbestanden (.XY, .XZ, .YZ)

De opbouw van dit type bestanden is zeer eenvoudig. Het zijn series van records waarop steeds 3 getallen staan, die een punt identificeren. Het formaat van de getallen is vrij, zolang ze door spaties of komma's gescheiden zijn.

Het eerste getal is een codering om het einde van een lijnstuk aan te geven; de twee volgende getallen zijn coördinaten, in de volgorde die overeenkomt met de extensie van het betreffende bestand (bijvoorbeeld: in het bestand met de extensie .XY is het tweede getal van ieder record de X-coördinaat van het betreffende punt en het derde de Y-coördinaat.

Het tekenen van de topografische kaart overlay gebeurt als volgt:

- 1 na het lezen van de eerste regel van een nieuw lijnstuk wordt de 'tekenpen' gepositioneerd op de met de coördinaten corresponderende locatie op het scherm. Als het einde van het bestand bereikt is, is ook de tekenactie afgerond.
- 2 vervolgens worden records één voor één gelezen en verwerkt. Als het codegetal ongelijk is aan 9999. wordt vanaf de huidige tekenpositie een lijn getrokken naar het door de coördinaten gespecificeerde punt. Als de code wel gelijk is aan 9999., dan wordt er geen lijn getrokken. De verwerking van de rest van het bestand begint dan weer bij stap 1. De coördinaten op een dergelijk afsluitrecord hebben geen betekenis, maar moeten wel aanwezig zijn om een leesfout te voorkomen.

De kleur van de getrokken lijnen is bepaald in het configuratie bestand MODGRID.CFG (zie bijlage III voor een beschrijving van dit bestand).

Bijlage B.2 Manual STYXZ

Inhoud

	Voorwoord	iv
1	Inleiding	1 – 1
	1.1 Wat is STYXZ	1 – 1
	1.2 Aanwijzingen bij deze handleiding	1 – 1
2	Theorie STYXZ	2 – 1
	2.1 Modelschematisatie	2 – 1
	2.2 Transportformuleringen STYXZ	2 – 3
	2.3 Chemische formuleringen STYXZ	2 – 5
	2.4 Rekenmethodiek STYXZ	2 – 9
	2.5 Numerieke dispersie en FCT	2 – 11
3	Samenstelling instrument	3 – 1
	3.1 Opbouw instrument	3 – 1
	3.2 STYXZG	3 – 3
	3.2.1 Werking	3 – 3
	3.2.2 Fileoverzicht	3 – 4
	3.3 STYXZ	3 – 25
	3.3.1 Werking	3 – 25
	3.3.2 Fileoverzicht	3 – 26
	3.2.3 Foutmeldingen	3 – 46
	3.3 STYXZF	3 – 47
	3.3.1 Werking	3 – 47
	3.3.2 Fileoverzicht	3 – 50

3.4	STYXZMAP: grafische presentatie	3 — 56
	3.4.2 Fileoverzicht	3 — 59
	3.4.3 Foutmeldingen	3 — 59
3.5	STYXZP: getalsmatige analyse	3 — 60
	3.5.1 Werking	3 — 60
	3.5.2 Fileoverzicht	3 — 64
	3.5.3 Foutmeldingen	3 — 80
4	Literatuur	4 — 1
Bijlage A	Termen	A — 1
Bijlage B	Installatie	B — 1

Voorwoord

Deze handleiding bevat een beschrijving van de opbouw van het instrument STYXZ, van de theorie erachter en van gebruikte programma's en files. De handleiding is een herziening op de handleiding STYXZ 5.00 (oktober 1994) en heeft betrekking op de STYXZ-versie 5.10 (juli 1995). Ten opzichte van de oude handleiding zijn een aantal fouten verwijderd en zijn de meest recente aanpassingen van STYXZ opgenomen. Bovendien is een beschrijving van het nieuwe presentatie-programma STYXZMAP opgenomen. De STYXZ-versie 5.10 is opgenomen in het CMT-ORPHEUS. Omdat het instrument nog in ontwikkeling is, zullen toekomstige wijzigingen in de handleiding worden opgenomen.

1 Inleiding

1.1 Wat is STYXZ

STYXZ is een instrument waarmee het transport van verontreinigingen in het grondwater gemodelleerd kan worden. De naam STYXZ is het acroniem voor Simulation of Transport in a 3-dimensional (YXZ) space. Het instrument is door het Waterloopkundig Laboratorium ontwikkeld naar aanleiding van de grote behoefte aan inzicht in de driedimensionale verspreiding van verontreinigingen in het grondwater.

Met STYXZ kan uitsluitend het transport van stoffen gemodelleerd worden. De stroming van het grondwater die aan het transport ten grondslag ligt moet met een hydrologisch model berekend worden. Dit hydrologische model moet in staat zijn waterfluxen te berekenen, zodat vooralsnog vooral de modellen MODFLOW (USGS, driedimensionaal) en SFYXZ (WL, tweedimensionaal) hiervoor in aanmerking komen.

In STYXZ wordt de grondwaterstroming gecombineerd met concentraties van stoffen en chemische eigenschappen van de ondergrond. Het verspreidingspatroon dat vervolgens wordt berekend wordt op een aantal tijdstippen weggeschreven. Met behulp van een uitgebreide naverwerking kan deze verspreiding geografisch zichtbaar gemaakt worden. Bovendien kan de verspreiding gekwantificeerd worden in de vorm van concentraties op punten, verontreinigde volumina, fluxen tussen deelgebieden, normoverschrijdingen enz.

In principe kan met STYXZ het transport van elke stof gemodelleerd worden. Oorspronkelijk kon hierbij slechts één stof beschouwd worden, rekening houden met adsorptie/desorptie, afbraak/vorming, dispersie en diffusie. Bij de nieuwste versie bestaat de mogelijkheid om binnen een redox systeem het transport van zuurstof, methaan, sulfaat en sulfide bij de aanwezigheid van vast ijzer simultaan te modelleren. Bovendien bestaat bij deze versie de mogelijkheid om stoffen om te zetten in stoffen met een andere mobiliteit en om het transport van stoffen te modelleren in een dynamisch DOC (Dissolved Organic Carbon)-veld.

1.2 Aanwijzingen bij deze handleiding

In deze handleiding wordt de theorie achter STYXZ, de opbouw van het rekeninstrument, de te gebruiken commando's en de opbouw van de in- en uitvoerfiles beschreven. Er is nog geen zgn. 'quick-start' hoofdstuk aanwezig, zodat wordt aangeraden de hele handleiding door te nemen alvorens met het modellerwerk te beginnen.

In de handleiding worden voor een aantal zaken vaste afspraken gehanteerd. Teneinde duidelijkheid te scheppen worden de belangrijkste hier gegeven:

Eenheden

De eenheden die bij STYXZ gebruikt worden mogen vrij gekozen worden, tenzij in de redox-optie wordt gewerkt. Gewoonlijk worden de volgende eenheden gebruikt: meters, vierkante meters, kubieke meters, kilogrammen, milligrammen en milligrammen per kubieke meter en jaren. In de redox-optie *moeten* concentraties in molen worden gegeven. Omdat de eenheden vrij gekozen mogen worden, zullen hiervoor in de handleiding de volgende aanduidingen gebruikt worden:

- L : lengte
- O : oppervlakte
- V : volume
- M : massa
- T : tijd

Formats

Als een format (posities waarop de getallen in een file worden weggeschreven) wordt beschreven, dan wordt gerefereerd aan een format zoals dat in FORTRAN voorkomt. Met de formats F en E worden REALS weergegeven (bv -17.34 of -10.E+03), met het format I worden INTEGERS weergegeven (bv 4 of -185), met het format X wordt iets zonder betekenis aangegeven (12X betekent 12 keer een niet relevant teken) en met het format A worden CHARACTERS weergegeven (bv CHEMIS, of Z).

2 Theorie STYXZ

2.1 Modelschematisatie

Voordat de theorie van STYXZ behandeld wordt zal allereerst een toelichting gegeven worden bij de manier van schematisatie die in het algemeen wordt toegepast. Veel termen die in de rest van deze handleiding worden gebruikt worden in deze paragraaf toegelicht.

Bij de bestudering van de verspreiding van een stof in het grondwater met behulp van STYXZ wordt de ondergrond driedimensionaal (of eventueel tweedimensionaal) geschematiseerd. Dit betekent dat een abstractie van de werkelijkheid wordt gemaakt, die als invoer voor het model gebruikt kan worden.

Allereerst moet een gebied gekozen worden waarvoor de berekening wordt uitgevoerd. Dit gebied wordt in de horizontaal begrensd door een X- en een Y-coördinaat, en in de verticaal door een diepte (Z). Deze begrenzingen worden in eerste instantie bepaald door de hydrologie van het gebied. De horizontale begrenzing wordt hierbij zo gekozen dat er duidelijke hydrologische randvoorwaarden gekozen kunnen worden. In de diepte wordt vaak de diepst gelegen watervoerende laag die voor de hydrologie van het gebied van belang is als begrenzing gekozen, tenzij de modellering van het stoftransport vereist dat ook de scheidende laag in het model wordt opgenomen. Dit is relevant indien onderin het watervoerende pakket hoge concentraties verwacht worden, zodat er door diffusie een aanzienlijk stoftransport naar de scheidende laag kan optreden.

Vaak wordt ten behoeve van de transportmodellering uit dit hydrologische model een deelmodel gekozen. De horizontale begrenzing van dit deelmodel wordt bepaald door de mobiliteit van de te modelleren verontreiniging en door de vraagstelling die aan de studie ten grondslag ligt. Indien de mobiliteit van de stof bepalend is, worden de horizontale grenzen zo gekozen dat de stof zich binnen de te beschouwen periode niet over de randen van het model verplaatst. Soms leidt de vraagstelling ertoe dat het niet van belang is dat een deel van de verontreiniging het model via de randen verlaat, en kan een kleiner model gebruikt worden.

Het gekozen gebied wordt in de horizontaal door een rechthoek begrensd. In de verticaal (diepte) is de begrenzing variabel. Deze variatie kan veroorzaakt worden door een variabele diepteligging van watervoerende lagen. Vervolgens wordt over het gebied een verdeling van rekenvakken gelegd: het rekengrid. Dit grid moet rechthoekig zijn, maar mag variabel opgebouwd zijn. Het grid is het fijnst op de plekken die voor de studie het belangrijkste zijn. In de verticaal wordt in het algemeen de diepteligging van watervoerende en scheidende lagen als begrenzing gekozen. Vaak worden deze lagen in meerdere sub-lagen opgesplitst. De opdeling die op deze wijze ontstaat wordt in Figuur 2.1 weergegeven (Figuur wordt toegevoegd).

Het geschematiseerde gebied is nu het model, vaak ook aangeduid als het systeem. De kleinste elementen waaruit dit model is opgebouwd worden aangeduid als gridcellen, of als segmenten. De afmeting van deze segmenten bepaalt het oplossend vermogen van het model.

Het model wordt begrensd door zes modelranden: de boven- en onderrand en de noord-, oost-, zuid- en westrand. Indien het noodzakelijk is kunnen in het model inactieve segmenten worden opgenomen, indien er bijvoorbeeld een reliëf of een depot gemodelleerd moet worden.

De nummering van het rekengrid is voor STYXZ niet relevant, maar wel voor de presentatie van de resultaten. Omdat vaak in combinatie met MODFLOW wordt gewerkt, wordt de hierbij gebruikte nummering beschreven. Deze bestaat uit kolommen (X constant, Y en Z variabel), rijen (Y constant, X en Z variabel) en lagen (Z constant, X en Y variabel). De kolommen zijn van links naar rechts genummerd, de rijen van noord naar zuid (bovenkant scherm naar onderkant) en de lagen van boven naar beneden (bij MODFLOW van beneden naar boven!).

Het model in de figuur bestaat dus uit 7 kolommen, 10 rijen en 2 lagen. Bij de nummering van de segmenten wordt de volgende volgorde aangehouden: kolommen, rijen, lagen, zodat segment 1 links 'boven' in het bovenste vlak ligt en segment 140 rechts 'onder' in het onderste vlak. Indien een tweedimensionaal model gebruikt wordt verandert er in feite niets aan de indeling, maar is het aantal kolommen, rijen of lagen gelijk aan 1.

Figuur 2.1 Wordt toegevoegd

2.2 Transportformuleringen STYXZ

Een stof wordt in het grondwater op een aantal manieren getransporteerd:

- advectief;
- diffusief;
- dispersief.

Het advectieve transport vindt plaats door massastroming, het diffusieve transport door diffusie en het dispersieve transport door dispersie. Omdat het diffusieve en het dispersieve transport met eenzelfde formulering beschreven worden hanteert STYXZ voor beide transportvormen slechts één formulering, waarin een diffusie/dispersiecoëfficiënt is opgenomen die bestaat uit de sommatie van de diffusie en de dispersiecoëfficiënt.

Bij de beschrijving van de formuleringen van de verschillende soorten transport zijn de volgende symbolen gebruikt. De eenheden mogen hierbij vrij gekozen worden, al wordt in STYXZ bij voorkeur in meters, vierkante meters, kubieke meters, kg of mg en jaren gerekend.

- L : Lengte
- O : Oppervlakte
- V : Volume
- M : Massa
- t : tijd

Afzonderlijk kunnen de verschillende manieren van stoftransport als volgt geformuleerd worden:

Advectief

Dit betekent dat de stof onder invloed van stroming van het medium waarin de stof zich bevindt wordt verplaatst. Dit is het transport van de in het poriënwater opgeloste stof door de stroming van dit water. Als alleen advectief transport in de ondergrond van belang zou zijn zou de stof met een steil concentratiefront getransporteerd worden.

De grondwaterstroming die als basis voor het model gebruikt wordt bestaat per modelsegment uit een waterflux in de drie modelrichtingen: X, Y en Z. Deze ontbinding van de stroming is inherent aan de manier van werken, waarbij een kubus het kleinste modelement is. De fluxen worden voor alle vlakken gegeven, zodat het advectieve transport in elk segment in het totaal met zes fluxen beschreven wordt. De som van deze fluxen moet gelijk zijn aan nul (instroming = uitstroming). Het advectieve stoftransport over de verschillende vlakken van elk segment wordt met behulp van de volgende formule berekend:

$$\text{flux}_{i,j} = Q_{i,j} * C_i$$

waarbij:

$\text{flux}_{i,j}$ = het massatransport vanuit segment i naar segment j door stroming van segment i naar j (M/t)

$Q_{i,j}$ = het debiet van segment i naar segment j (V/t)

C_i = concentratie van stof in segment i (M/V)

Diffusief

Diffusieve verspreiding is de verplaatsing van stof onder invloed van een concentratiegradient. Door de Brownse beweging van de molekulen zal de stof zich netto van een hoge naar een lage concentratie bewegen. De diffusieve verspreiding speelt vooral een rol bij sterke concentratieovergangen, zoals aan het verontreinigingsfront en op het grensvlak tussen een depot en een watervoerend pakket.

Het diffusieve transport wordt op dezelfde wijze berekend als het dispersieve waarbij de volgende formulering wordt toegepast:

$$\text{flux}_{i,j} = D_{i,j} \cdot \text{Opp}_{i,j} \cdot (C_i - C_j) / \text{lengte}_{i,j}$$

waarbij:

$\text{flux}_{i,j}$	=	massatransport tussen segment i naar segment j door diffusie tussen segment i en j (M/t)
$D_{i,j}$	=	diffusie-coëfficiënt tussen segment i en segment j (O/t)
C_i	=	concentratie van stof in segment i (M/V)
C_j	=	concentratie van stof in segment j (M/V)
$\text{Opp}_{i,j}$	=	uitwisselings oppervlakte tussen segment i en j (O)
$\text{Lengte}_{i,j}$	=	afstand tussen de centra van segment i en j (L)

In STYXZ wordt de diffusie-coëfficiënt opgeteld bij de dispersie-coëfficiënt, en wordt vervolgens uitsluitend van de hierboven gegeven formulering gebruik gemaakt bij de bepaling van het diffusieve/dispersieve transport.

Dispersief

Dit is de verspreiding van de stof die als neveneffect van het advectieve transport optreedt. Er wordt longitudinale dispersie (dispersie evenwijdig aan de stroomrichting) en transversale dispersie (dispersie loodrecht op de stroomrichting) onderscheiden.

De longitudinale dispersie wordt veroorzaakt doordat stof via preferente stroombanen sneller dan gemiddeld verplaatst wordt, en door transport door slecht doorlatende gedeelten minder snel dan gemiddeld. Door deze dispersie treedt een vervlakking van het verspreidingsfront op.

De transversale dispersie wordt veroorzaakt doordat de stroming in de ondergrond rond korrels en ondoorlatende elementen moet plaatsvinden, en dus nooit direct van A naar B plaatsvindt. Deze verspreiding is goed te vergelijken met de spreiding die bij het bord van Gauss optreedt (spijkerbord met knikers levert een Gauss-kromme). Door de transversale dispersie treedt een uitwaaiering van de stof loodrecht op de stroomrichting op.

Het dispersieve transport wordt berekend uit de stroomsnelheid van het grondwater, uit de concentratiegradient en de dispersielengten. Voor de berekening van de longitudinale dispersie wordt dezelfde formule gebruikt als voor de transversale dispersie, waarbij echter de dispersiecoëfficiënten verschillen.

De gebruikte formulering is hetzelfde als de formulering die voor de beschrijving van de diffusieflux wordt gebruikt:

$$\text{flux}_{i,j} = D_{i,j} * \text{Opp}_{i,j} * (C_i - C_j) / \text{lengte}_{i,j}$$

waarbij:

$\text{flux}_{i,j}$	=	massatransport tussen segment i naar segment j door dispersie tussen segment i en j, (positief van i naar j, negatief van j naar i, M/t)
$D_{i,j}$	=	dispersie-coëfficiënt tussen segment i en segment j (O/t)
C_i	=	concentratie van stof in segment i (M/V)
C_j	=	concentratie van stof in segment j (M/V)
$\text{Opp}_{i,j}$	=	uitwisselings oppervlakte tussen segment i en j (O)
$\text{Lengte}_{i,j}$	=	afstand tussen de centra van segment i en j (L)

De dispersiecoëfficiënt wordt berekend uit de stroomsnelheid en de dispersielengte. De stroomsnelheid die hierbij gebruikt wordt is de gemiddelde stroomsnelheid in het betreffende segment die berekend wordt uit de wortel van de som van de kwadraten van de snelheden in de drie modelrichtingen (X, Y en Z). De dispersiecoëfficiënt volgt dan uit:

$$D_{i,j} = L_d * V$$

waarbij:

$D_{i,j}$	=	dispersie-coëfficiënt tussen segment i en segment j (O/t)
L_d	=	dispersielengte (longitudinaal of transversaal) (L)
V	=	gemiddelde stroomsnelheid grondwater (poriënsnelheid) (L/t)

2.3 Chemische formuleringen STYXZ

STYXZ biedt de mogelijkheid om het transport van stoffen te modelleren rekening houdend met adsorptie/desorptie en afbraak/vorming. Bovendien kan een zuurstof-methaan-sulfaat-sulfide-ijzer redox-systeem gemodelleerd worden. Voor uitvoerige chemische berekeningen wordt het instrument CHARON aangeraden, waarin transport gemodelleerd kan worden in een volledig chemisch evenwichtssysteem. CHARON beschouwt de chemie echter dermate uitgebreid dat er slechts een beperkt aantal segmenten gemodelleerd kan worden (eind 1994 orde 5000).

Lineaire adsorptie/desorptie

In STYXZ wordt de adsorptie/desorptie met behulp van de partitietheorie beschreven. Dit betekent dat er wordt aangenomen dat de verhouding tussen de concentratie van een stof in oplossing en aan de vaste fase constant is. De beschouwde adsorptie is dus lineaire adsorptie. Er wordt uitgegaan van een instantaan evenwicht tussen de opgeloste en de geadsorbeerde fase, hetgeen gerechtvaardigd wordt door de veelal trage stroming van het grondwater.

De lineaire adsorptie wordt beschreven met behulp van de verdelings-coëfficiënt:

$$k = \frac{\text{geadsorbeerde concentratie (M/M)}}{\text{opgeloste concentratie (M/V)}}$$

De verdelings-coëfficiënt k heeft meestal de eenheid m^3/kg (soms l/kg). De geadsorbeerde concentratie is het gehalte verontreiniging in M per kg grond (hier mg/kg), de opgeloste concentratie is het gehalte verontreiniging in M per V water (hier mg/m^3).

In de praktijk wordt deze adsorptieformulering meestal gebruikt bij de modellering van het transport van organische verontreinigingen. Deze adsorberen voornamelijk aan de organische fractie van de vaste fase, het POC (Particulair Organisch Carbon). De verdelingscoëfficiënt die gebruikt moet worden volgt uit de fractie organisch koolstof van de vaste fase en de verdelingscoëfficiënt tussen organisch koolstof en water:

$$k = \text{OC} * K_{\text{OC}}$$

waarin:

OC gehalte organisch koolstof in de vaste fase (kg/kg)

K_{OC} verdelingscoëfficiënt tussen organisch koolstof en water (m^3/kgOC)

De K_{OC} is inmiddels voor veel stoffen gemeten. Omdat deze meting echter in de praktijk erg lastig is uit te voeren zijn er uit de literatuur vele waarden beschikbaar, waarbij niet duidelijk is welke waarde de beste is. De waarden zijn echter goed te gebruiken om een indruk van de verspreidingsnelheid van een stof te krijgen. Indien de waarde van de K_{OC} niet bekend is kan deze met behulp van een omrekeningsformule uit de K_{OW} (verdelingscoëfficiënt tussen octanol en water) berekend worden. Deze waarde is voor de meeste organische stoffen bekend.

Een complicerende factor bij de beschouwing van de adsorptie vormt de adsorptie van stof aan DOC (Dissolved Organic Carbon). Indien de adsorptie aan DOC een rol speelt, wordt de totale hoeveelheid stof in oplossing dus gelijk aan de echt opgeloste hoeveelheid plus de aan DOC geadsorbeerde hoeveelheid. Door adsorptie aan DOC kan de mobiliteit van goed adsorberende verontreinigingen aanzienlijk verhoogd worden.

De adsorptie aan DOC wordt op dezelfde wijze beschouwd als de adsorptie aan POC:

$$K_{\text{DOC}} = \frac{\text{aan DOC geadsorbeerde concentratie (mg/kg}_{\text{DOC}})}{\text{opgeloste concentratie (mg/m}^3)}$$

De waarde van de K_{DOC} is gerelateerd aan de K_{POC} via de adsorptiepreferentie aan DOC boven POC:

$$K_{\text{DOC}} = X_{\text{DOC}} * K_{\text{POC}}$$

De waarde van X_{DOC} wordt in het algemeen in de orde van 0.1 gekozen. De reden hiervan is dat wordt aangenomen dat de adsorptie aan DOC minder sterk is dan die aan POC. Dit wordt veroorzaakt doordat DOC meer polaire groepen bevat dan POC omdat het min-of meer oplosbaar is in water. De meeste organische verontreinigingen hebben echter een sterkere affiniteit met apolaire groepen (sterk hydrofoob), zodat deze bij voorkeur aan POC zullen adsorberen.

Indien in de modellering de adsorptie aan DOC beschouwd wordt, kan nog steeds met één verdelingscoëfficiënt gerekend worden. Deze is in dat geval gelijk aan de verhouding tussen de geadsorbeerde concentratie en de *totale* concentratie in oplossing (echt opgelost plus geadsorbeerd aan DOC). Deze verdelingscoëfficiënt wordt aangeduid als de 'over-all' verdelingscoëfficiënt.

In een speciedepot vindt produktie van DOC plaats, zodat de concentratie hier veel hoger is dan in het watervoerende pakket. Het DOC zal zich uit het depot in het watervoerende pakket verplaatsen, zodat de DOC-concentratie in het systeem een tijd- en plaatsafhankelijke variabele is. Teneinde het transport van een stof in dit variabele DOC-veld correct te kunnen modelleren bestaat in STYXZ de optie om eerst de verspreiding van DOC te berekenen, en deze als invoer voor de verspreidingsberekening van een stof te gebruiken. De over-all verdelingscoëfficiënt wordt in dat geval bij elk tijdstip van DOC-uitvoer opnieuw berekend, en is dus variabel in de tijd en in de ruimte.

Teneinde de rekensnelheid op te voeren (zie paragraaf 2.4) wordt in het instrument in de praktijk niet met de verdelingscoëfficiënt gewerkt maar met de fractie opgelost. Dit is de verhouding tussen de hoeveelheid stof in oplossing en de totale hoeveelheid van een stof. De fractie opgelost is afhankelijk van de verdelingscoëfficiënt, de porositeit en de dichtheid van de vaste fase volgens de volgende formulering:

$$f_o = \frac{1}{1 + k * (1-p) * s / p}$$

waarin:

- f_o fractie opgelost (-)
- k verdelingscoëfficiënt (m^3/kg)
- p porositeit (-)
- s dichtheid vaste fase (M/V)

De fractie opgelost is een constante ongeacht de mate van verontreiniging en wordt alleen bepaald door eigenschappen van grond, bodem, bagger en de eigenschappen van de stof zelf. In een depot/waterbodem systeem zal de adsorptie-coëfficiënt voor waterbodem/depot anders zijn dan voor het watervoerend pakket. Dit betekent dat de fractie opgelost een ruimtelijk afhankelijke variabele wordt. In de modellering wordt deze variabele voor elk segment apart berekend. Indien adsorptie aan DOC optreedt is de fractie opgelost afhankelijk van de DOC-concentratie. Omdat deze varieert in ruimte en tijd wordt de fractie opgelost in dat geval ook variabel in ruimte en tijd bepaald.

Vorming/afbraak

Bij afbraak daalt de hoeveelheid stof terwijl deze getransporteerd wordt. Afbraak is relevant voor veel organische verontreinigingen, maar ook voor DOC. Bij vorming ontstaat in het systeem een stof. Dit kan op twee manieren gebeuren:

- een stof wordt gevormd als metaboliet bij de afbraak van een andere stof, zodat de stof dus gevormd wordt terwijl de uitgangsstof getransporteerd wordt;
- een stof wordt gevormd uit vast materiaal, waarbij de uitgangsstof dus niet mobiel is.

De eerste manier van vorming vindt plaats bij de omzetting van organische stoffen in metabolieten, en de tweede manier bij de vorming van DOC of methaan bij de afbraak van organisch materiaal. Beide soorten vorming kunnen met STYXZ gemodelleerd worden.

Afbraak (vorming is negatieve afbraak) is in STYXZ als volgt geformuleerd:

$$M_n = M * C_{\text{afbr}} * dt$$

waarbij:

M_n	massa stof na afbraak (M)
M	massa stof voor afbraak (M)
C_{afbr}	afbraak coëfficiënt (1/t)
dt	tijdstapgrootte (t)

De afbraakcoëfficiënt wordt als halfwaardetijd ingevoerd, die als volgt uit de afbraakcoëfficiënt is af te leiden:

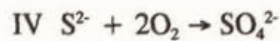
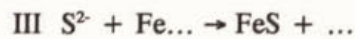
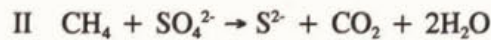
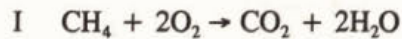
$$T_{\text{half}} = \ln 2 / C_{\text{afbr}}$$

Voor de vorming wordt een vormingscoëfficiënt ingevoerd en een initieel aanwezige massa uitgangsmateriaal. De afbraak/vorming wordt bij elke tijdstap berekend nadat het transport is berekend.

Redox

Met STYXZ kan het redox-systeem zuurstof-methaan-sulfaat-sulfide-ijzer gemodelleerd worden. Hierbij wordt het transport van- en de reactie tussen deze stoffen simultaan beschouwd. Deze optie kan gebruikt worden om te evalueren of het milieu in het watervoerende pakket onder een speciedepot eventueel sterk sulfidisch wordt, waardoor een mobilisatie van zware metalen kan optreden. Een dergelijk milieu kan ontstaan indien het grondwater bestaat uit zeewater, en het gehalte aan reactief ijzer in de ondergrond gering is. Een andere gebruiksmogelijkheid van de redox-optie is de analyse van de mogelijkheid dat het milieu in het depot/watervoerende pakket oxisch wordt waardoor zware metalen gemobiliseerd kunnen worden.

De volgende reacties worden beschouwd:



Hierbij worden de volgende regels gehanteerd:

- alle reacties verlopen in de gegeven richting en niet omgekeerd;
- indien methaan en zuurstof samen aanwezig zijn reageren deze totdat één van beiden op is, daarna reageert één van beiden door met een andere stof;
- sulfide reageert pas met ijzer indien alle zuurstof op is;
- het ijzer bestaat uit het reactieve deel van het ijzer dat in de ondergrond aanwezig is (ijzercarbonaat (FeCO_3), Sideriet) of ijzerhydroxide ($\text{Fe}(\text{OH})_3$, Goethiet).

2.4 Rekenmethodiek STYXZ

In principe kan met behulp van de formuleringen die in de paragrafen 2.2 en 2.3 zijn gegeven een computerprogramma worden opgesteld, waarmee het transport van stoffen in het grondwater gemodelleerd kan worden. In de praktijk blijkt echter dat de rekentijden van een dergelijk programma zeer lang zijn. Dit wordt veroorzaakt doordat met de concentratie in oplossing wordt gewerkt. Deze concentratie mag per rekentijdstap niet al te veel veranderen, teneinde onstabilitäten in het model te voorkomen. Dit betekent dat in het algemeen maar met een zeer kleine rekentijdstap gewerkt mag worden zodat de rekentijd dus lang wordt.

Teneinde de rekentijd te verlagen (de tijdstapgrootte te verhogen) wordt in STYXZ niet met de opgeloste concentratie, maar met de totale massa gewerkt. In dat geval bepaalt de totale hoeveelheid van de stof de rekentijdstap, in plaats van de opgeloste hoeveelheid. Omdat bij de veel stoffen die gemodelleerd worden de meeste massa in de vaste fase aanwezig is, zal door deze truc de rekentijd sterk dalen.

Dat het toegestaan is het transport ook via de totale massa verontreiniging te bereken blijkt uit de volgende beschouwing. Hier wordt de concentratie van één segment beschouwd. Van dit segment wordt een totaalvolume van $V \text{ m}^3$ beschouwd. De hoeveelheid water in dit segment is dus gelijk aan ($V * \text{porositeit}$), en de hoeveelheid vaste fase is gelijk aan ($V * (1 - \text{porositeit})$). De verontreiniging is in oplossing aanwezig, maar ook geadsorbeerd aan de vaste fase.

De basisformulering voor het advectieve transport is:

$$\text{flux} = Q * C$$

Hierin is C de concentratie in oplossing, en Q het waterdebiet. Hiervoor geldt:

$$C = M_o / V_w$$

waarin:

M_o massa in oplossing

V_w volume water waarin de massa zich bevindt

Nu is de massa in oplossing via een factor (fractie opgelost) uit te drukken in de totale massa die in een segment aanwezig is:

$$M_o = M_t * f_o$$

waarin:

M_t totale massa

f_o fractie opgelost

Als alles in de flux-formulering wordt ingevuld ontstaat de volgende formulering:

$$\text{flux} = Q * M_t * f_o / V_w$$

Hierin is de fractie opgelost een constante die gedurende de berekening niet varieert. Ook het volume aan water varieert niet, zodat beide factoren tot een nieuwe segmentsafhankelijke constante kunnen worden omgezet, het 'adsorberende volume'. Dit is gelijk aan:

$$V_{ads} = V_w / f_o$$

waarin:

V_{ads} adsorberende volume

Het adsorberende volume wordt voordat de berekening wordt uitgevoerd voor elk segment berekend. Vervolgens kan de flux uit het debiet en de totale massa worden berekend, zodat de gewenste vergroting van de tijdstap is verkregen.

De diffusieve en de dispersieve flux wordt als één flux berekend, waarbij de gebruikte diffusie/dispersiecoëfficiënt bestaat uit de sommatie van de diffusie en de dispersiecoëfficiënt. Ook hier kan met de totale massa in plaats van met de opgeloste concentratie gerekend worden:

$$\text{flux} = D * opp * (M_{t,i}/V_{ads,i} - M_{t,j}/V_{ads,j}) / L$$

V_{ads} heeft hierbij dezelfde waarde als bij het advectieve transport.

Het volgende voorbeeld geeft een indruk van de winst die behaald wordt indien met de totale massa in plaats van met de opgeloste massa wordt gerekend. Neem hiervoor een segment met een totaalvolume van 1 m^3 en een porositeit van 0.3. De dichtheid van de vaste fase is 2500. De concentratie in oplossing is 1 mg/m^3 , de verdelingscoëfficiënt tussen de opgeloste en geadsorbeerde fase is $0.1 \text{ m}^3/\text{kg}$ (dit is in de praktijk al een behoorlijk lage waarde).

In dit segment is een hoeveelheid van 0.3 mg stof in oplossing. Indien de concentratie in oplossing per tijdstap maximaal 5% mag veranderen, mag er per tijdstap dus maximaal $0.05 * 0.3 = 0.015$ mg verplaats worden.

De hoeveelheid vast materiaal in dit segment is $0.7 * 2500 = 1750$ kg. Hieraan is een hoeveelheid van $1750 * 0.1 = 175$ mg stof geadsorbeerd. De totale massa van de stof in het segment is dus $175 + 0.3 = 175.3$ mg. Indien de totale hoeveelheid per tijdstap 5% mag variëren, betekent dit dat er per tijdstap maximaal 8.765 mg verplaats mag worden. Dit is dus bijna 600 maal zo veel als bij de situatie waar alleen de concentratie in oplossing wordt beschouwd. Bij deze verdelingscoëfficiënt mag de tijdstap dus 600 maal zo groot gekozen worden, waarbij de rekentijd dus evenredig zal afnemen!

2.5 Numerieke dispersie en FCT

Bij de numerieke rekenmethode die in STYXZ wordt gehanteerd zal het berekeningsresultaat beïnvloed worden door de rekenmethode. Indien een continue rekenmethode gehanteerd zou worden (zoals het modelleren van het transport van afzonderlijke deeltjes) zou deze beïnvloeding achterwege blijven. De beïnvloeding van de berekeningsresultaten door de berekeningswijze wordt numerieke dispersie genoemd. Er zijn twee belangrijke bronnen van numerieke dispersie aan te geven: transportdispersie en griddispersie.

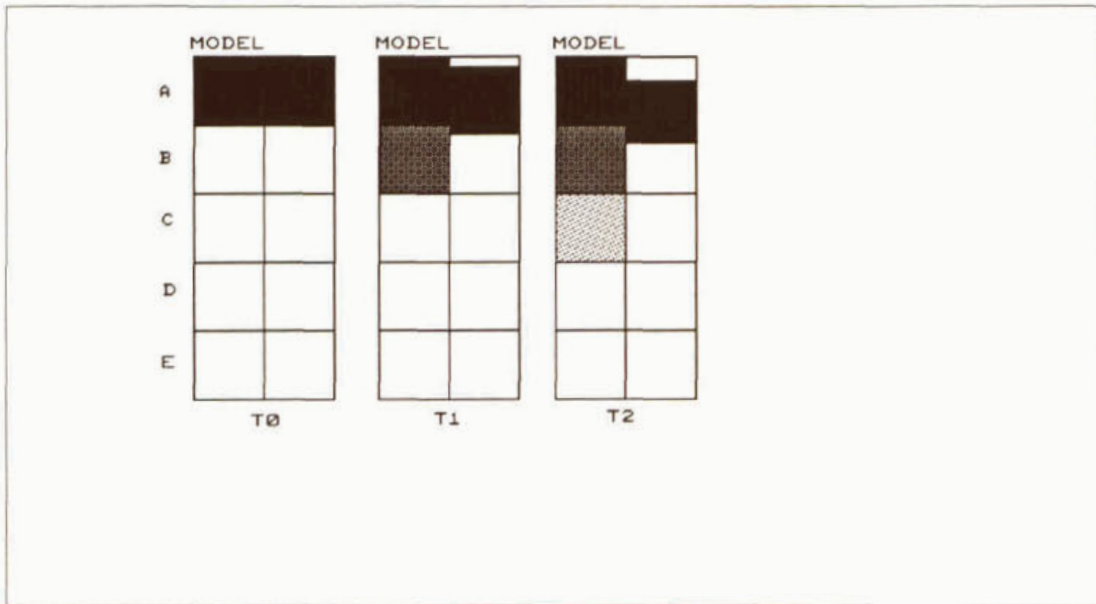
Transportdispersie

Transportdispersie wordt veroorzaakt doordat het model is opgebouwd uit discrete rekenvakken. Dit betekent dat de kleinst mogelijke verplaatsingsafstand binnen het model gelijk is aan de afmeting van één rekenvak. Het proces is het best te verklaren aan de hand van een plaatje. Initieel (tijdstip 0) is hierbij alle stof in vak A aanwezig. Door stroming is op tijdstip 1 een klein gedeelte van de stof naar vak 2 verplaatst. Het werkelijke plaatje laat zien hoe de situatie er dan uit zou zien (de stof verplaatst zich in een blokfront). In het model wordt echter alle stof uitgesmeerd over vak A en B. Bij de volgende tijdstap zal de stof in werkelijkheid iets verder vak B indringen. In het model komt de stof dan al in vak C enz.

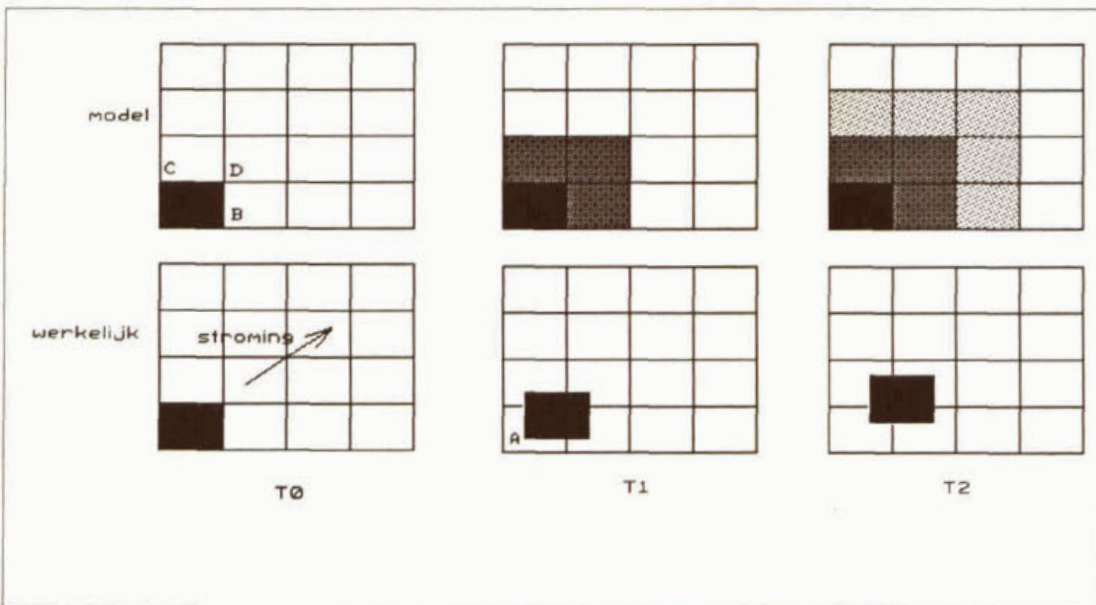
De transportdispersie leidt ertoe dat de stof meer over het systeem wordt uitgesmeerd dan in werkelijkheid het geval zou zijn. Teneinde deze dispersie te beperken moeten voldoende kleine rekenvakken gebruikt worden.

Griddispersie

Ook de griddispersie wordt veroorzaakt door de discrete opdeling van het model. Deze vormt de twee- of driedimensionale uitwerking van de transportdispersie. Ook hier werkt een tekening verhelderend. Stof die van van A naar vak D stroomt zal in het model via de vakken B en C getransporteerd worden. Omdat deze vakken een uitwisseling hebben met hun buurvakken, zal de stof uiteindelijk in vakken terecht komen waar deze in werkelijkheid nooit kan komen. Ook deze vorm van dispersie zorgt voor een sterkere verspreiding van de verontreiniging over het systeem. De griddispersie werkt het sterkst als het transport onder een hoek van 45 graden op de gridlijnen plaatsvindt.



Figuur 2.2 Transportdispersie: links het berekende transport, rechts het werkelijke transport voor drie tijdstippen



Figuur 2.3 Griddispersie: boven de berekende verspreiding, onder de werkelijke verspreiding op drie tijdstippen

Er bestaan mogelijkheden om de numerieke dispersie in een model aanzienlijk te beperken. In STYXZ wordt hiervoor de FCT-methode gebruikt. FCT staat hier voor Flux Corrected Transport. Deze methode wordt uitgewerkt in een artikel van Boris en Book (Boris, 1973) en staat ook wel bekend als de 'Boris en Book methode'. Deze methode wordt ook in de instrumenten CHARON en DELWAQ toegepast. Op de theorie achter deze methode zal in deze manual niet verder worden ingegaan.

Bij gebruik van de FCT-methode is de numerieke dispersie vrijwel afwezig, zodat de berekeningsresultaten vrijwel uitsluitend door de invoerparameters bepaald worden. Voor de diffusie en de dispersiecoëfficiënten moeten in dat geval de correcte waarden worden ingevuld.

Indien de FCT-methode niet wordt gebruikt wordt vaak aangenomen dat de numerieke dispersie van een vergelijkbare omvang is als de werkelijke dispersie en diffusie, zodat de werkelijke diffusie/dispersie in de berekeningen niet wordt beschouwd. Vaak ook is de potentiële numerieke dispersie groot maar niet relevant. Dit treedt op indien de concentratiegradienten door het transport al sterk zijn afgevlakt. In dat geval is het concentratieverschil tussen de segmenten dermate laag dat zowel de numerieke dispersie als de werkelijke dispersie gering zijn. Een dergelijk geval treedt vaak op onder een depot waar lange tijd eenzelfde toevoer van verontreiniging naar het watervoerende pakket plaatsvindt.

3 Samenstelling instrument

3.1 Opbouw instrument

Het instrument STYXZ bestaat uit vier computerprogramma's, die opeenvolgend gebruikt moeten worden. Het betreft de volgende programma's met bijhorende gebruiksvolgorde:

1. STYXZG (voorbewerking)
2. STYXZ (transportberekening)
3. STYXZF (grafische naverwerking)
4. STYXZMAP (grafische naverwerking)
5. STYXZP (getalsmatige naverwerking)

De volgende tabellen geven een overzicht van de in- en uitvoerfiles van de verschillende programma's die voor de verschillende fasen van de berekening worden gebruikt. De niet-gearceerde namen zijn files die altijd moeten voorkomen, de gearceerde files zijn optioneel. Achter de namen van de invoerfiles is tussen haakjes aangegeven welk programma deze file levert. Indien hierbij MODFLOW wordt gegeven betekent dit in feite de in- en uitvoerskil MODGRID.

Tabel 3.1 Fileoverzicht van het programma STYXZG

STYXZG: verwerkt de resultaten van een hydrologische berekening tot een transportveld waarmee STYXZ verder kan rekenen			
invoer		uitvoer	
commandofile	STYXZG.ING (zelf aanmaken)	controlefile	WATER.SGO
gegevens	WATER.ST1 (MODFLOW) WATER.ST2 (MODFLOW)	resultaat	FLOW.UNF VOL.UNF FLOWC.UNF FLOWF.UNF

Tabel 3.2 Fileoverzicht van het programma STYXZ

STYXZ: berekent het transport van verontreinigingen			
invoer		uitvoer	
commandofile	STYXZ.INP (zelf aanmaken)	controlefile	STYXZ.OUT
gegevens	FLOW.UNF (STYXZG) VOL.UNF (STYXZG) FLOWF.UNF (STYXZG) STYXZ.DOC (STYXZ) STYXZ.MET (STYXZ)	resultaat	STYXZ.FLM STYXZ.LGT STYXZ.DOC STYXZ.MET

Tabel 3.3 Fileoverzicht van het programma STYXZF

STYXZF: toont de resultaten van een STYXZ-berekening op het scherm			
invoer		uitvoer	
gegevens	STYXZ.FLM (STYXZ) KAART.DIG (zelf aanmaken)	resultaat	STYXZF.OUT STYXZ001.PIC

Tabel 3.4 Fileoverzicht van het programma STYXZMAP

STYXZMAP: toont de resultaten van een STYXZ-berekening op het scherm			
invoer		uitvoer	
gegevens	STYXZ.FLM (STYXZ) NAAM.MAP BEBOUWD.MPL BOOMGRD.MPL BOS.MPL HOOFDWEG.MPL LAND.MPL SNELWEG.MPL WATER.MPL WATERLN.MPL WATERWEG.MPL WEGEN.MPL	resultaat	

Tabel 3.5 Fileoverzicht van het programma STYXZP

STYXZP: geeft een getalsmatige analyse van de resultaten van een STYXZ-berekening			
invoer		uitvoer	
commandofile	STYXZP.POP (zelf aanmaken)		
gegevens	STYXZ.FLM (STYXZ)	resultaat	TMP.POP STYXZP.PBM STYXZP.PBF STYXZP.PLB STYXZP.PLC STYXZP.PLG STYXZP.PLL STYXZP.PLM STYXZP.PLV STYXZP.PLX

3.2 STYXZG: bewerking grondwaterstroming

3.2.1 Werking

STYXZG is het koppelprogramma tussen de hydrologische berekening en de transportberekening met STYXZ. Het programma heeft een aantal taken:

- verwerking van de diffusie en de dispersie in het transportveld;
- verwijdering van overtollige delen van het hydrologische model;
- opsplitsing van modellen;
- overige manipulaties zoals het sluiten van modelranden, het omleiden van transporten enz;
- vertaling van de geformatteerde gegevens naar ongeformatteerde, snel leesbare invoer voor STYXZ.

Verwerking van de diffusie en de dispersie in het transportveld

Het stromingsveld dat door een hydrologisch model wordt berekend bevat uitsluitend het advectieve transport. Bij stoftransport zijn echter dispersie (longitudinaal en transversaal) en diffusie ook van belang. In STYXZG wordt de waarde van deze transporttermen als totale term berekend (diffusie + dispersie) en weggeschreven.

Verwijdering van overtollige delen van het hydrologische model

Meestal is het gebied dat het hydrologische model beslaat groter dan voor het transportmodel noodzakelijk is. Het kan in dat geval een hoop rekentijd besparen als het niet gebruikte deel uit de schematisatie verwijderd wordt. Bovendien is de stroming in de rand van een hydrologisch model in het algemeen niet correct door numerieke effecten. Daarom worden deze randcellen vrijwel altijd uit het model verwijderd.

Opsplitsing van modellen

Een hydrologisch model is gewoonlijk opgebouwd uit een aantal lagen van aanzienlijke dikte (orde meters). Bij een transportmodel is het noodzakelijk in sommige lagen kleine laagdikten (orde centimeters) te gebruiken indien het diffusieve transport bij de berekeningen van belang is. Deze laagopdeling kan met behulp van verdelingsfactoren verkregen worden.

Overige manipulaties zoals het sluiten van modelranden, het omleiden van transporten enz

Het blijkt in de praktijk handig te zijn om aanpassingen te kunnen doen in het transportmodel. Hierbij moet gedacht worden aan het sluiten van randen voor transport, het aanpassen van eigenschapsnummers, het omkeren van de debieten, het aanpassen van de dispersie enz.

Vertaling van de geformatteerde gegevens naar ongeformatteerde, snel leesbare invoer voor STYXZ

De invoerfiles voor STYXZG bestaan uit forse ASCII-files, die betrekkelijk traag zijn in te lezen. Teneinde de rekensnelheid van STYXZ op te voeren worden de invoerfiles voor STYXZ ongeformatteerd weggeschreven.

STYXZG wordt aangestuurd via commando's die in een invoerfile (*.ING) gegeven worden. Deze commando's mogen in willekeurige volgorde opgegeven worden, maar worden in een vaste volgorde uitgevoerd. Omdat sommige commando's elkaar kunnen overlappen, is het zinnig rekening te houden met de verwerkingsvolgorde. Het commando CHEIG (verander eigenschapnummers) wordt bijvoorbeeld voor het commando NEWEIG (ken aan segmenten een nieuw eigenschapnummer toe) uitgevoerd. Als beide commando's betrekking hebben op overlappende groepen van segmenten, dan is voor het overlappende deel dus alleen het laatste commando (NEWEIG) relevant. De volgende verwerkingsvolgorde geldt (de commando's worden toegelicht bij STYXZG.ING):

- 1 lees invoer (CONVDE, VOLUME, FLOW)
- 2 pas eigenschapnummers en randnummers aan (CHEIG, CHBND)
- 3 verwijder deel schematisatie (REMOVE)
- 4 splits de modellagen (SPLITHO)
- 5 pas de stroming aan (TOPCLO, ALLCLO, REVERS)
- 6 zet de pointers voor de FCT-methode (FCT)
- 7 ken nieuwe eigenschapnummers toe (NEWEIG, NEWBND)
- 8 voer RC-waarden in (RC)
- 9 maak een waterbalans (WATBAL)
- 10 bereken de diffusie/dispersie (DIFBND, DIFDIS, CHARON, DIFEIG, DIFFUS, ALFA-L, ALFA-T, POROS)
- 11 schrijf de unformatted uitvoer
- 12 schrijf een rapport (VEROUT, REPORT, DEPOUT)

3.2.2 Fileoverzicht

De volgende in- en uitvoerfiles zijn voor STYXZG van belang:

Tabel 3.5 Fileoverzicht van het programma STYXZG

invoer		uitvoer	
commandofile	STYXZG.ING	controlefile	WATER.SGO
gegevens	WATER.ST1 WATER.ST2	resultaat	FLOW.UNF VOL.UNF FLOWF.UNF FLOWC.UNF

Bij het gebruik van STYXZG moet één invoerfile meegegeven worden. Het startcommando ziet er dus altijd als volgt uit:

STYXZG invoer1

Hierbij bestaat invoer1 dus uit de file STYXZG.ING (*.ING). De naam van deze invoerfile mag vrij gekozen worden. In de invoerfile worden de namen van de files WATER.ST1 en WATER.ST2 gegeven. De naam van de *.SGO file wordt automatisch gelijk gesteld aan die van de *.ING file. De namen van de files FLOW.UNF, VOL.UNF en FLOWF.UNF zijn altijd hetzelfde.

STYXZG.ING

Functie

In de file STYXZG.ING (naam mag vrij gekozen worden, als extensie wordt echter ING aangeraden) worden de commando's gegeven voor het programma STYXZG. Er wordt dus aangegeven welke waarde voor de dispersielengten en de diffusie moeten worden gebruikt, welk deel van het grid verwijderd moet worden, welke lagen verfijnd moeten worden en welke overige bewerkingen uitgevoerd moeten worden.

Opbouw

De file bestaat uit een opeenvolging van commando's, soms gevolgd door één of meer regels met invoerparameters. Indien na een commando een willekeurige hoeveelheid invoerregels gegeven mogen worden, moet dit commando afgesloten worden met een END. Boven elk commando kan een commentaarregel worden toegevoegd. De commando's mogen in een willekeurige volgorde staan, en het format voor de invoerparameters is vrij.

Bij een commando dat door een getalswaarde wordt gevolgd mag dit getal echter pas vanaf positie 13 voorkomen. De lijst invoercommando's wordt besloten met het commando END.

De algemene regels voor de invoer van waarden voor segmenten, eigenschappen, randen of modellagen zijn de volgende (universeel voor STYXZ, STYXZG en vrijwel voor STYXZP):

segmenten	Segmenten worden meestal als groep van segmenten aangegeven (één segment komt niet zo vaak voor). Hierbij wordt het eerste segment en het laatste segment aangegeven. Indien er slechts één segment relevant is wordt twee maal dezelfde waarde gegeven. Indien 12 15 wordt gegeven betekent dit dat de parameter geldt voor de segmenten 12, 13, 14 en 15. Indien 164 164 wordt gegeven wordt alleen segment 164 bedoeld.
eigenschappen	Als een eigenschapsnummer wordt bedoeld dan wordt dit nummer voorafgegaan door -1. Met -1 5 worden dus alle segmenten met eigenschapsnummer 5 bedoeld.
randen	Een randnummer wordt aangegeven door één negatief getal. Met -9 wordt dus rand -9 bedoeld.
lagen	Een laagnummer wordt aangegeven met twee dezelfde negatieve getallen. Met -5 -5 wordt dus de modellaag -5 bedoeld. Lagen zijn van boven naar beneden genummerd.

De volgende commando's kunnen worden gegeven:

ALFA-L	(12X,F12.4) Met dit commando wordt de longitudinale dispersielengte ingesteld (L).
ALFA-T	(12X,F12.4) Met dit commando wordt de transversale dispersielengte ingesteld (L).
ALLCLO	Hiermee worden alle uitstromingen naar de modelranden op nul gezet. Alle massa blijft dus in het model, en hoopt zich in de randcellen op.
CHARON	Dit is een optie die gebruikt kan worden als het transportveld voor het model CHARON moet worden geproduceerd. In plaats van de file FLOW.UNF wordt dan de file FLOWC.UNF aangemaakt, waar ook informatie over de oppervlakken tussen de segmenten en de afstanden tussen de segmenten is opgenomen.
CHBND	Regel free format (2*INTEGER) Dit commando geeft de mogelijkheid het nummer van een rand te veranderen. Op de volgende regel moet het achtereenvolgens het oude en het nieuwe randnummer worden ingevoerd.

- CHEIG** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER)
Met dit commando worden eigenschapnummers veranderd. Het commando wordt gevolgd door regels waarin het oude eigenschapnummer en het nieuwe nummer wordt gegeven.
- CONVDE** (12X,F12.4) (REAL)
Indien er geen speciale opdracht gegeven wordt hanteert het model dezelfde eenheid van tijd als bij de ingevoerde hydrologie (bij MODFLOW zijn dit dagen). Met de opdracht CONVDE kan het model omgezet worden naar een andere tijdseenheid. Op positie 13 moet achter dit commando de omrekeningsfactor van tijdseenheid 1 naar tijdseenheid 2 (meestal dagen naar jaren (365.25)) worden ingevuld. Het model converteert dan de invoerfluxen die meestal in m³/dag zijn weergegeven naar uitvoerfluxen in m³/jaar.
- DEPOUT** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER)
Als dit commando wordt meegegeven worden alle uitwisselingen met de rand(en) die in de volgende regel worden gegeven in de uitvoerfile weggeschreven. Deze optie kan gebruikt worden om bijvoorbeeld een indruk van de kwel over een bepaalde rand te krijgen.
- DIFBND** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER, negatief)
In het model is de dispersieve en diffusieve flux over de modelranden gelijk aan nul. Met dit commando kan worden aangegeven bij welke randuitwisselingen wel diffusie en dispersie beschouwd moet worden.
- DIFDIS** (12X,I12)
Met dit commando wordt aangegeven tussen welke segmentnummers alleen diffusie beschouwd moet worden in plaats van diffusie en dispersie. Deze optie wordt gebruikt om het dispersieve transport tussen een laag met een lage stroomsnelheid (het depot) en een laag met een hoge stroomsnelheid (de ondergrond) uit te schakelen. Het dispersieve transport tussen deze lagen wordt berekend uit het gemiddelde van de snelheden in beide lagen, en leidt dus tot een te hoog transport uit de laag met een lage stroomsnelheid.
Na het commando moet vanaf positie 13 het eigenschapnummer gegeven worden van de betreffende laag. Indien dit nummer positief is betekent dit dat er dispersie is tussen twee segmenten als één van de segmenten een eigenschapnummer heeft dat lager is dan dit getal. Bij alle andere uitwisselingen is er dan uitsluitend diffusie. Als het nummer negatief is is er dispersie als beide segmenten een eigenschapnummer hebben dat kleiner is dan dit getal.
- DIFEIG** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER, REAL)
Met deze optie is het mogelijk de diffusieparameter voor een eigenschapnummer in te voeren in O/t (meestal m²/jaar). In de volgende regels wordt per eigenschapnummer het eigenschapnummer en de waarde van de diffusie-coëfficiënt.

- DIFFUS** (12X,F12.4)
Hier wordt de waarde van de diffusiecoëfficiënt gegeven in O/t (meestal m²/jaar). Gewoonlijk wordt een waarde van 0.01 m²/jaar gehanteerd. Deze is 4 maal lager dan de diffusiecoëfficiënt van NaCl in zuiver water. De waarde is verlaagd om het diffusieremmende effect van de porositeit en de tortuositeit te verdisconteren.
- END** Verplicht eindcommando, wordt ook gebruikt om een aantal opdrachten af te sluiten.
- FCT** Dit commando geeft aan dat het FCT (Flux Corrected Transport) rekenschema moet worden gebruikt. Behalve de files FLOW.UNF en VOL.UNF wordt in dat geval ook nog de file FLOWF.UNF aangemaakt.
- FLOW** (12X,A20) (CHARACTER)
Hierachter volgt vanaf positie 13 de naam van de file waarin de uitwisselingsoppervlakken en de debieten voor het systeem worden gegeven (*.ST2, *.FLO of *.FLU).
- NEWBND** Afgesloten met END, regels free format (3*INTEGER)
In STYXZ wordt voor elke rand bijgehouden hoeveel stof het systeem via deze rand verlaat. De optie NEWBND maakt het mogelijk de reeds toegekende randnummers te wijzigen in relatie tot het eigenschapnummer van de segmenten die aan die rand grenzen (dit in tegenstelling tot het commando CHBND). Na dit commando moet op de volgende regel het betreffende randnummer en het eigenschapnummer worden ingevoerd, gevolgd door het nieuwe randnummer.
- NEWEIG** Afgesloten met END, regels free format (3*INTEGER)
Hiermee kan aan segmenten of aan groepen van segmenten een nieuw eigenschapnummer worden toegekend. Er zijn twee mogelijke opdrachten: van segment - tot segment of van laagnummer - tot laagnummer. Bij de eerste optie wordt het nieuwe eigenschapnummer toegekend aan alle segmenten met een nummer dat in het gegeven bereik ligt, en bij de tweede optie wordt het nieuwe eigenschapsnummer toegekend aan alle modellagen binnen het gegeven bereik. Als het om celnummers gaat zijn de gegeven waarden positief, als het om lagen gaat zijn de nummers negatief.
In de volgende regels wordt achtereenvolgens per aanpassing het segment-van/laag-van, segment-tot/laag-tot en het nieuwe eigenschapsnummer opgegeven.
- POROS** (12X,F12.4)
Voor de berekening van de disperie moet worden voor elk segment de gemiddelde stroomsnelheid berekend. Omdat dit de echte snelheid moet zijn (dus niet de filtersnelheid) is hiervoor de porositeit nodig. Voor het hele systeem wordt hiervoor dezelfde waarde gebruikt.

- RC** (12X,F6.2,A1), afgesloten met END, regels free format (INTEGER)
Met RC wordt voor de betreffende segmenten voor alle uitwisselingen met andere segmenten een weerstand voor diffusie aangebracht. Deze weerstand is dan 10^{RC} maal zo groot als de onbelemmerde diffusie. Voor informatie over de achtergrond van de RC-coëfficiënt wordt verwezen naar het rapport 'Beperking diffusie baggerspeciedepots' (T843, de Rooij, 1993).
Achter het commando wordt vanaf positie 13 de waarde van de RC coëfficiënt gegeven, en op positie 19 de letter T of F (verplicht). Indien een T wordt ingevoerd zal het advectieve transport in de segmenten waarvoor de RC-waarde geldt op nul worden gezet. Bij een F verandert er niets aan het transport. Op de volgende regels moeten de eigenschapnummers worden ingevoerd waarvoor deze RC-waarde moet gelden. De RC-waarde geldt dan voor alle uitwisselingen tussen segmenten met dit nummer en segmenten met een ander nummer.
- REMOVE** (6X,A6), volgende regel free format (4*INTEGER)
REMOVE geeft de mogelijkheid een deel van het hydrologische model uit de schematisatie te verwijderen, en zodoende dus voor een 'sub-model' een transportberekening uit te voeren. Bij vrijwel iedere toepassing wordt in ieder geval de rand van het model verwijderd, omdat hier als gevolg van numerieke problemen vaak niet-reele stromingen voorkomen. Bij dit commando wordt vanaf de zijkanten van het model kolommen of rijen verwijderd worden. De te verwijderen kolommen en/of rijen moeten in de volgende regel worden aangegeven. Hierbij worden eerst de X-waarden gegeven (kolommen, twee integers), en dan de Y-waarden (rijen, twee integers). Als de waarden A, B, C en D worden gegeven dan loopt de X van A t/m B (kolom A t/m kolom B) de Y van C t/m D (rij C t/m D). Het commando REMOVE kan op positie 7 gevolgd worden door het commando OUTPUT. Met dit commando wordt opdracht gegeven om een conversietabel aan te maken waarin de oude en de nieuwe nummering van de segmenten naast elkaar wordt gegeven.
- REPORT**
Met dit commando wordt opdracht gegeven om een uitvoerige analyse van de hydrologische invoer in de uitvoerfile *.SGO weg te schrijven. Deze analyse wordt per eigenschapnummer uitgevoerd en heeft betrekking op stroomsnelheden (drie richtingen), verblijftijden, longitudinale en transversale dispersie, volumina, dikten en uitwisselings-oppervlakken. Bij de analyse wordt aangegeven wat de minimale, maximale en gemiddelde waarde is, met de bijhorende segmentnummers.
- REVERS**
Bij gebruik van deze optie worden alle debieten van richting omgekeerd. Deze mogelijkheid kan gebruikt worden om te analyseren waar een verontreiniging vandaan komt.

- SPLITHO** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, n*REAL)
Dit commando geeft opdracht een horizontale splitsing van de modellagen uit te voeren.
Per laag moet worden aangegeven hoe de verdeling moet plaatsvinden. Hierbij wordt eerst het laagnummer gegeven, vervolgens het aantal lagen waarin deze laag wordt gesplitst en de factoren die voor de verdeling worden gebruikt. Deze factoren gelden van boven naar beneden.
De factoren die voor de verdeling worden opgegeven zijn relatief: indien dus 0.3 en 0.6 wordt opgegeven zal de laag in 1/3 (bovenste laag) en 2/3 (onderste laag) worden verdeeld. Het is echter handig om ervoor te zorgen dat de som van de factoren gelijk is aan 1.0, zodat in plaats van 0.3 en 0.6 de waarden 0.3333 en 0.6667 worden geven. Voor de verdeling maakt dit echter niet uit.
Het commando wordt regel voor regel uitgevoerd. Dit betekent dat eerst de 1^e regel wordt uitgevoerd, vervolgens de laagnummering wordt aangepast, dan de 2^e regel enz. Het is dus handig om te beginnen met de onderste laag (hoogste laagnummer) en vervolgens naar boven toe te werken. Een andere volgorde is toegestaan, al moet dan van te voren bedacht worden welk toekomstig nummer de op te delen lagen gaan krijgen.
- TOPCLO** Bij dit commando worden alle uitwisselingen met randen die boven het model liggen op nul gezet. Er zal dan dus geen verontreiniging via kwel het systeem verlaten.
- VEROUT** regel free format (2*INTEGER)
Deze optie geeft alle uitvoerinformatie voor alle segmenten met het opgegeven kolom- en rijnummer. Dit zijn dus segmenten die boven elkaar liggen. Het kolom- en rijnummers moeten in de volgende regel worden opgegeven.
- VOLADJ** (12X,F12.4,I12)
De rekentijd van STYXZ wordt bepaald door de verblijftijd van van het segment met de kortste verblijftijd. Vaak ligt dit segment niet op de transportroute van de verontreiniging, en is het volume van dit segment dus niet van belang bij de modellering van het stoftransport. Dit betekent dat het is toegestaan het volume van dit segment te verhogen, zodat de rekentijd van het model zal afnemen.

Met de opdracht VOLADJ wordt aangegeven voor welke segmenten een volumeaanpassing moet worden uitgevoerd. Het criterium dat voor deze aanpassing wordt gebruikt is de laagste verblijftijd die in het systeem voorkomt. De parameters hiervoor moeten op de posities 13 en 23 achter het commando gegeven worden. De waarden hebben de volgende betekenis:

- 1: Factor ten opzichte van de laagste verblijftijd. Deze geeft aan dat het volume van alle segmenten van het model met een verblijftijd tot X (waarde van de factor) maal de kleinste verblijftijd in het model met een factor X wordt vermenigvuldigd.
- 2: Nieuwe eigenschapnummer van de aangepaste segmenten. Met behulp van dit nummer kan worden nagegaan voor welke segmenten een aanpassing is gedaan zodat gecontroleerd kan worden of deze aanpassing ook toegestaan is. Als 0 wordt gegeven worden geen aanpassingen gedaan.

VOLUME

Hierachter volgt vanaf positie 13 de naam van de file waarin de volumina van de segmenten worden gegeven (*.ST1 of *.VOL).

voorbeeld

In deze voorbeeldfile wordt een overzicht gegeven van alle opties die bij STYXZG mogelijk zijn. In een werkelijke invoerfile kan vaak met een beperkt aantal commando's worden volstaan. Het commentaar tussen de regels begint op positie 13, en mag achterwege gelaten worden. Ter wille van de duidelijkheid is hier voorafgaand aan de commando's een maximaal commentaar opgenomen.

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
Kopregel met commentaar, hier kan bijvoorbeeld de naam van de
berekening e.d worden opgenomen.
De longitudinale dispersielengte is 1 meter
ALFA-L 1.0
de transversale dispersielengte is 0.001 meter (1 mm)
ALFA-T 0.001
alle randen worden gesloten voor uitstroming
ALLCLO
maak een waterbeweging voor CHARON (FLOWC.UNF)
CHARON
het randnummer -1 wordt veranderd in -8
CHBND
-1 -8
pas eigenschapnummers aan, eigenschap 1 wordt 13, eigenschap
2 wordt 14 (afgesloten met END)
CHEIG
1 13
2 14
END
CONVDE zet dagdebiet om in jaardebiet (1 jaar = 365.25 dag)
365.25
geef voor de eigenschappen 1 en 3 informatie over randuitwisselingen,
(afgesloten met END); levert per segment de flux, plus een accumulatie
van de fluxen per eigenschap en een totale accumulatie
DEPOUT
1
3
END
voor de randen -1, -2, -3, -4 en -7 moet wel diffusie/dispersie
over de rand worden meegenomen (afgesloten met END)

```

```

DIFBND
-1
-2
-3
-4
-7
END
    de dispersie wordt beschouwd voor alle segmenten met een
    eigenschapnummer kleiner dan 6, dus wel tussen 4 en 5,
    maar niet tussen 5 en 6 of 7 en 8; tussen segmenten met de
    uitgesloten eigenschapnummers wordt alleen diffusie beschouwd
DIFDIS
-6
    voor de randen 1, 2 en 4 wordt een afwijkende diffusie/
    dispersie coëfficiënt gebruikt van respectievelijk 0.000273,
    0.000546 en 0.000273 m2/jaar (afgesloten met END)
DIFEIG
1 0.000273
2 0.000546
4 0.000273
END
    de default diffusiecoëfficiënt is 0.01 m2/jaar
DIFFUS
0.01
    reken met Flux Corrected Transport
FCT
    naam van de file met de debieten
FLOW
WATBAL.ST2
    randnummer -1 wordt vervangen door -5 voor alle segmenten met een
    eigenschapnummer van 7
NEWBND
-1 7 -5
END
    pas eigenschapnummers aan: het eigenschapnummer van de
    segmenten van 1 t/m 100 wordt 2, dat van de segmenten van
    101 t/m 200 wordt 3 en dat van modellaag 7 wordt 12 (afgesloten
    met END)
NEWEIG
1 100 2
101 200 3
-7 -7 12
END
    porositeit voor snelheidsberekening, dit is dus de porositeit
    van het watervoerende pakket
POROS
0.35
    ken een RC-waarde toe aan de eigenschapnummers 3, 7, 8 en 9
    dit betekent dat de weerstand voor diffusie 104 maal zo hoog is
    als normaal; zet het advectieve transport in deze segmenten niet
    op nul (afgesloten met END)
RC
4.0 F
3
7
8
9
END
    verwijder modelranden, en schrijf conversietabel. In het nieuwe model
    loopt de X van segment 2 t/m segment 12 (dus 11 kolommen) en de Y van segment
    3 t/m segment 9 (dus 7 rijen)
REMOVEOUTPUT
2 12 3 9
    maak een analyse van het model, deze wordt in de SGO file
    weggeschreven
REPORT
    draai alle stromingen om
REVERS
    splits de modellagen 4, 3, 2 en 1 (moet van boven naar beneden
    worden opgegeven), laag 4 wordt in 2 delen van 0.3 (bovenste)
    en 0.5 (onderste) gesplitst, laag 3 in 5 delen van 0.05, 0.1, 0.2,
    0.3 en 0.35 enz (afgesloten met END)

```



```
SPLITHO
  4  2  .3  .5
  3  5  .05 .1  .2  .3  .35
  2  5  .35 .3  .2  .1  .05
  1  2  .6  .4
END
TOPCLO
      sluit alle uitwisselingen met de bovenrand die het model verlaten
      voor het segment met kolomnummer 25 en rijnummer 30 wordt alle
      uitvoerinformatie weggeschreven
VEROUT
25 30
      pas de volumina van limiterende segmenten aan, hier wordt het
      volume van de segmenten met een verblijftijd tot 10 maal de kleinste
      verblijftijd in het model met een factor 10 vermenigvuldigd, het
      eigenschapnummer van deze segmenten wordt 21
VOLADJ
10.0      21
      naam file met volumina
VOLUME
WATBAL.ST1
afsluitend commando
END
```

WATER.ST1 (ook wel WATER.VOL)

Functie

De file WATER.ST1 (de keuze van de naam is vrij, de extensies VOL en ST1 worden algemeen gebruikt) bevat de volumina van de gridelementen en het eigenschapsnummer van deze elementen. De file wordt aangemaakt met behulp van MODGRID uit de uitvoer van MODFLOW. Eventueel zou de file ook met behulp van andere hydrologische pakketten geproduceerd kunnen worden, mits deze voldoen aan de door STYXZ gestelde eisen met betrekking tot de nauwkeurigheid van de waterbalans van de gridcellen.

opbouw

De file bevat één kopregel waarin het aantal segmenten, het aantal kolommen, rijen en lagen en het format van de volgende records beschreven wordt. Hierna volgen de volumina en de eigenschapsnummers van alle segmenten van het grid. De volgorde hiervan is gelijk aan de nummering die bij de STYXZ berekeningen wordt aangehouden. Het eerste record geeft dus het volume en het eigenschapsnummer van segment 1, het tweede record die van segment 2 enz.

lengte: aantal segmenten + 1 records

regel 1: format: (4I7,A15)
 1: aantal segmenten in de file (is gelijk aan aantal X (kolommen) * aantal Y (rijen) * aantal Z (lagen)), is dus het aantal records dat nog volgt
 2: aantal X (kolommen)
 3: aantal Y (rijen)
 4: aantal Z (lagen)
 5: format van de volgende records, hier (E14.7,I6)
 6: eventueel commentaar

volgende

regels: format: in overeenstemming met het in de kopregel gegeven format
 1: volume van het segment (V)
 2: eigenschapsnummer van het segment

voorbeeld

```
.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
  600   10   15   4(E14.7,I6)   voorbeeldberekening
2.5000000E+03   1
2.5000000E+03   1
1.0000000E+03   1
1.0000000E+03   1
1.0000000E+03   1
1.0000000E+03   1
1.0000000E+03   1
2.5000000E+03   1
2.5000000E+03   1 enz
```


De voorbeeldfile (alleen de eerste 10 records zijn weergegeven) geeft de volumina en de eigenschappen van een model dat 600 segmenten bevat. Dit model is opgebouwd uit 10 kolommen (X), 15 rijen (Y) en 4 lagen. Het format van de records is (E14.7,I6). Het commentaar luidt 'voorbeeldberekening'. Het volume van de eerste gridcel is 2500 m³, en het eigenschapnummer is 1. Het volume van de derde gridcel is 1000 m³, het eigenschapnummer is 1. De file is 601 records lang.

WATER.ST2 (ook wel WATER.FLU of WATER.FLO)

Functie

De file WATER.ST2 (de keuze van de naam is vrij, algemeen zijn de extensies FLO, FLU en ST2) bevat het debiet van segment naar segment, het oppervlak van het grensvlak tussen deze segmenten en de afstand tussen het centrum van het segment en het grensvlak. De file wordt aangemaakt met behulp van MODGRID uit de uitvoer van MODFLOW. Ook voor deze file geldt dat deze eventueel ook met behulp van andere hydrologische pakketten geproduceerd kunnen worden, mits deze voldoen aan de door STYXZ gestelde eisen met betrekking tot de nauwkeurigheid van de waterbalans van de gridcellen.

opbouw

De file bevat één kopregel waarin het aantal records en het format van deze records wordt gegeven. De volgende records bevatten achtereenvolgens: het nummer van het segment waar het debiet vandaan komt, het nummer van het segment waar het debiet naar toe gaat, het oppervlak van het grensvlak tussen de segmenten in m², de afstand in meters van het centrum van het eerste segment naar het grensvlak, de afstand in meters van het centrum van het tweede segment naar het grensvlak, het debiet tussen de twee segmenten in m³ per dag.

Een negatief segmentnummer betekent dat de uitwisseling naar een modelrand plaatsvindt. In dat geval is de afstand van het centrum naar het grensvlak gelijk aan dat van het segment waaruit/waarnaar de uitwisseling plaatsvindt. Een negatief debiet betekent tegengestelde stroming.

In de file moet voor alle grensvlakken tussen de gridcellen die in het model voorkomen een uitwisseling gegeven worden, ook al is deze gelijk aan nul. De reden hiervan is dat bij een debiet van nul er wel een diffusief transport kan optreden. Voor de berekening hiervan is het nodig de afstand tot het scheidingsvlak en het oppervlak hiervan te kennen.

Voor een correcte berekening is het noodzakelijk dat de fout in de waterbalans van elke segmenten (de 'lekkage') vrijwel nul is. Gewoonlijk wordt als eis aangehouden dat de lekkage van een segment niet meer mag zijn dan één maal het volume in 10000 jaar (het segment mag in 10000 jaar niet leeg (of vol) lopen).

lengte: aantal uitwisselingen + 1 records

Bij een file die uit een MODFLOW-berekening is afgeleid is het aantal uitwisselingen gelijk aan $((n_{kolom}+1)*n_{rij}*n_{laag}) + ((n_{rij}+1)*n_{kolom}*n_{laag}) + ((n_{laag}+1)*n_{kolom}*n_{rij}) - (8*2) - (n_{kolom}-2)*4 - (n_{rij}-2)*4 - (n_{laag}-2)*4$ (+ eventuele interneranduitwisselingen, bijvoorbeeld onttrekkingen), waarbij n_{kolom} het aantal kolommen (X) is, n_{rij} het aantal rijen (Y) en n_{laag} het aantal lagen (Z).

regel 1: format: (I7,A15)
 1: aantal uitwisselingen in de file, dit is dus het aantal records dat nog volgt
 2: format van de volgende records, hier (2I6, 4E14.7)

volgende

regels: format: in overeenstemming met het in de kopregel gegeven format
 1: segment 1 ('cel-van')
 2: segment 2 ('cel-naar')
 3: oppervlak van het grensvlak tussen de segmenten in O (m²)
 4: afstand van het centrum van segment 1 naar het grensvlak in L (meters)
 5: afstand van het centrum van segment 2 naar het grensvlak in L (meters)
 6: debiet van segment 1 naar segment 2 in V/t (m³ per dag)

voorbeeld

```
.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
2050 (2I6, 4E14.7)
-4   1  0.1000000E+03 0.2500000E+02 0.2500000E+02 1.3400000E-01
   1   2  0.1000000E+03 0.1250000E+02 0.1250000E+02 7.3400000E+00
   1  11  0.2000000E+02 0.2500000E+02 0.2500000E+02-3.1000000E-02
   1 150  0.1250000E+04 0.1000000E+01 0.1000000E+01 2.1100000E-04
-4   11  0.1000000E+03 0.2500000E+02 0.2500000E+02 1.4600000E-01
enz
```

De voorbeeldfile (alleen de eerste 6 records zijn weergegeven) geeft 2050 uitwisselingen. Het format van de records is (2I6, E14.7). De eerste uitwisseling is van rand -4 naar segment 1. Het oppervlak van het grensvlak tussen de rand en segment 1 is 100 m². Voor de afstand van de rand tot het grensvlak is dezelfde waarde aangehouden als voor de afstand van het centrum van segment 1 tot het grensvlak, namelijk 25 meter. Het debiet is 0.134 m³ per dag.

De tweede uitwisseling is van segment 1 naar segment 2. Het oppervlak van het grensvlak tussen deze twee segmenten is 100 m². De afstand van het centrum van segment 1 tot het grensvlak is 12.5 meter. De afstand van het centrum van segment 2 tot het grensvlak is eveneens 12.5 meter. Het debiet tussen segment 1 en segment 2 is gelijk aan 7.23 m³ per dag. De derde regel geeft het debiet tussen segment 1 en segment 11. Omdat dit debiet negatief is, vindt de stroming dus van segment 11 naar segment 1 plaats. De file is 2051 records lang.

STYXZG.SGO

functie

In de *.SGO file wordt een analyse van de gebruikte hydrologie (*.ST1 en *.ST2 files) gemaakt. Met behulp van deze analyse kan grofweg een indruk verkregen worden van de mate van variatie die in de hydrologie voorkomt en van de geschiktheid van de hydrologie voor transportberekeningen. Het is zinnig enige aandacht aan de informatie uit de SGO-file te schenken!

Opbouw

De *.SGO file kan voor een nadere toelichting in zes functionele blokken ingedeeld worden, waarvan de blokken 2-6 alleen bij het commando REPORT weggeschreven worden:

- blok 1: interpretatie van de invoer uit de *.ING file, met eventuele foutmeldingen;
- blok 2: informatie over de in- en uitstromingen over de randen van het model;
- blok 3: informatie over de schematisatie;
- blok 4: de gemiddelde te verwachten numerieke dispersie;
- blok 5: een analyse van alle modellagen met betrekking tot verblijftijd, stroomsnelheid e.d.;
- blok 6: een overzicht van het voorkomen van de verschillende eigenschapnummers.

Voorbeeld

Blok 1

Het eerste blok wordt niet weergegeven. Als alle commando's goed zijn geïnterpreteerd is dit een letterlijke herhaling van de file *.ING. Eventuele foutmeldingen zijn hier opgenomen (in dat geval stopt het programma).

Blok 2

In de eerste regels wordt het aantal segmenten (49266) en het aantal uitwisselingen in het model (141769) vermeld. Vervolgens wordt een lijst gegeven waarin voor elke rand de instroming en de uitstroming (in m³/jaar) wordt gegeven, gevolgd door de procentuele in- en uitstroming. Met deze informatie kan een indruk verkregen worden van het belang van de verschillende randen. Onder de tabel wordt de totale instroming en de totale uitstroming en het verschil hiertussen gegeven. Dit verschil moet zeer klein zijn (in dit geval 0.0625 op de 904470).

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....
Output water balance:
      number of segments : 49266
      number of exchanges :141769

bound   inflow   outflow      X-in      X-out
  1 0.30271E+06 0.00000E+00  33.468    0.000
  2 0.32087E+05 0.33491E+05   3.548    3.703
  3 0.31429E+04 0.34096E+04   0.347    0.377
  4 0.31665E+04 0.34167E+04   0.350    0.378
  5 0.31794E+04 0.33948E+04   0.352    0.375
  6 0.14092E+05 0.14846E+05   1.558    1.641
  7 0.14090E+05 0.14839E+05   1.558    1.641
  8 0.14172E+05 0.15168E+05   1.567    1.677
  9 0.14159E+05 0.15165E+05   1.565    1.677
 10 0.14142E+05 0.15162E+05   1.564    1.676
 11 0.70413E+05 0.75774E+05   7.785    8.378
 12 0.13904E+06 0.15181E+06  15.372   16.785
 13 0.27291E+06 0.30779E+06  30.174   34.030
 14 0.71663E+04 0.00000E+00   0.792    0.000
 15 0.00000E+00 0.25020E+06   0.000   27.662

total: 0.90447E+06 0.90447E+06 0.62500E-01 0.000

```

Blok 3

In dit blok wordt een analyse gemaakt van de verblijftijden in het model. Hiertoe wordt eerst de maximale en de minimale verblijftijd bepaald. Vervolgens worden tussen deze waarden 20 klassen gemaakt en wordt geanalyseerd hoeveel cellen binnen deze klassen vallen. Op die manier ontstaat een frequentieverdeling van de verblijftijd. Vervolgens wordt de klasseindeling verschoven, net zolang totdat er nog maar een klein gedeelte van de cellen in de klasse met een korte verblijftijd valt.

Het doel van deze analyse is om na te gaan of de rekensnelheid van het model is op te voeren door de verblijftijd van de cellen met de kortste verblijftijd aan te passen. Indien dit relatief weinig cellen zijn, die niet in de stroomrichting leggen, is dit toegestaan. In het tweede deel van dit blok worden de celnummers van deze cellen gegeven.

Het eerste blok bevat de klassen van verblijftijden, het aantal cellen dat binnen een klasse valt en het percentage hiervan. In het voorbeeld vallen dus 11879 cellen binnen de klasse met een verblijftijd van 0.06664-40.97 dagen, hetgeen 92.43% van het totale aantal cellen is. Er vallen 475 cellen binnen de klasse van 40.97-81.86 dagen enz. In het tweede deel van het blok worden de celnummers van de cellen die binnen de laagste verblijftijd vallen gegeven. In dit geval zijn maar enkele cellen weergegeven. Per cel wordt de verblijftijd, het celnummer, het laag, kolom en rijnummer gegeven. Omdat in dit voorbeeld zeer veel cellen in de klasse met de laagste verblijftijd vallen, is het niet zinvol deze cellen te selecteren teneinde de rekentijd te verlagen.

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
classes of res. times
time,      number perc
0.6664E-01 11879 92.43
0.4097E+02  475  3.70
0.8186E+02   64  0.50
0.1228E+03  114  0.89
0.1637E+03   90  0.70
0.2046E+03  101  0.79
0.2455E+03  114  0.89
0.2864E+03    0  0.00
0.3273E+03    7  0.05
0.3682E+03    3  0.02
0.4091E+03    1  0.01
0.4500E+03    0  0.00
0.4909E+03    2  0.02
0.5318E+03    0  0.00
0.5727E+03    0  0.00
0.6136E+03    0  0.00
0.6545E+03    0  0.00
0.6953E+03    1  0.01
0.7362E+03    0  0.00
0.7771E+03    1  0.01

```


res. time,	segm,	vlak,	col,	row
0.1592E+00	6525	4	15	3
0.1632E+00	6526	4	16	3
0.1665E+00	6527	4	17	3
0.1699E+00	6528	4	18	3
0.1486E+00	6566	4	14	4
0.1024E+00	6567	4	15	4
0.1037E+00	6568	4	16	4
0.1049E+00	6569	4	17	4
0.1063E+00	6570	4	18	4
0.1078E+00	6571	4	19	4

Blok 4

Hier wordt een overzicht gegeven van de de schematisatie: 69 segmenten in de X-richting (kolommen), 42 segmenten in de Y-richting (rijen) en 17 segmenten in de Z-richting (lagen). Totaal zijn er 49266 segmenten ($69 \cdot 42 \cdot 17$) en 141769 uitwisselingen. Er komen 13 eigenschapnummers voor en 15 randnummers.

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|

Output REPORT:

Assuming Modflow Schematisation:

number of segments E-W:	69
number of segments N-S:	42
number of segments depth:	17
number of segments total:	49266
number of exchanges total:	141769
number of properties:	13
number of boundaries:	15

Blok 5

In de eerste regel wordt een globale analyse van het totale advectieve en het totale dispersieve (inclusief diffusieve) transport gemaakt. Het advectieve transport is in dit model ongeveer 1.5 maal zo sterk als het dispersieve transport, zodat STYXZG concludeert dat het probleem door advectie gedomineerd wordt. De minimale verblijftijd in het systeem is 0.0022 tijdseenheid.

In de tabel wordt voor elke modellaag de gemiddelde numerieke dispersie in de horizontaal en in de verticaal berekend. Een lage waarde duidt hierbij op een kleine invloed van de numerieke dispersie. De numerieke dispersie is in het algemeen in de horizontaal veel groter dan in de verticaal omdat de segmentafmetingen in de horizontaal groter zijn.

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|

This problem is advective dominant: advective and dispersive flow, ratio: 0.2535E+03 0.1674E+03
1.51

minimal residence time: 0.0022

Average numerical dispersion horizontal and vertical

at deltt at lowest res time:

1	0.0000	0.6425
2	33.4137	0.7107
3	33.4137	0.7559
4	6.2498	0.9989
5	6.5379	1.0165
6	6.7863	1.0293
7	24.3506	1.4511
8	23.7295	4.4740
9	23.8982	4.5454
10	23.8675	4.5835
11	23.8023	4.5696
12	23.6297	7.5971
13	23.6297	7.2644
14	23.6297	7.1303
15	23.4010	9.9489
16	23.4010	27.3488
17	23.3032	52.0803

Blok 6

Van dit blok is maar een klein gedeelte weergegeven. Het bevat voor een aantal parameters voor elke modellaag een analyse naar de gemiddelde, minimale en maximale waarde die in het model wordt aangetroffen. Tevens wordt het kolom- en rijnummer gegeven van het segment waar de minimale en maximale waarde bereikt wordt. Deze analyse wordt voor de volgende parameters uitgevoerd:

Thickness	:	dikte van een segment (Z-richting) in meters
Vel-N	:	snelheid in de X-richting (zuid-noord) in L/t (m/j)
Vel-E	:	snelheid in de Y-richting (west-oost) in L/t (m/j)
VEL-Z	:	snelheid in de Z-richting (boven naar beneden) in L/t (m/j)
Res time	:	verblijftijd in jaren
Disp-T	:	transversale dispersie in O/t (m ² /jaar)
Disp-L	:	longitudinale dispersie in O/t (m ² /jaar)
Volume	:	volume in V (m ³)
Area-H	:	horizontaal oppervlak in O (m ²)
Area-V	:	verticaal oppervlak in O (m ²)

In dit voorbeeld wordt alleen de dikte en de snelheid in noordelijke richting gegeven. Voor modellaag 8 is de gemiddelde dikte dus 6.20 meter met een minimale waarde van 6.07 meter en een maximale waarde van 6.29 meter. De minimale waarde wordt in het segment met kolomnummer 40 en rijnummer 1 bereikt (segment 22978), de maximale waarde in het segment met kolomnummer 1 en rijnummer 38 (segment 20324).

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|

N.B.: numbers with a ● are multiplied with 1000.0

	Thickness			Vel-N				
1	3.45	3.13	3.65	0.000*	0.000*	0.000*		
2	3.81	3.71	3.90	0.775	-8.357	12.639		
3	6.85	3.71	15.56	0.775	-8.357	12.639		
4	4.65	4.56	4.77	0.129	-5.062	5.752		
5	4.65	4.56	4.77	0.124	-7.791	8.496		
6	4.65	4.56	4.77	0.122	-11.876	12.611		
7	6.20	6.07	6.29	0.386	-50.221	52.339		
8	6.20	6.07	6.29	0.378	-39.751	41.886		
9	6.20	6.07	6.29	0.377	-31.652	33.800		
10	6.20	6.07	6.29	0.377	-25.409	27.564		
11	6.20	6.07	6.29	0.376	-20.629	22.789		
12	10.23	10.01	10.38	0.376	-9.769	11.934		
13	10.23	10.01	10.38	0.376	-9.769	11.934		
14	10.54	10.31	10.69	0.376	-9.769	11.934		
15	15.50	15.16	15.73	0.373	-2.717	4.986		
16	46.49	45.49	47.18	0.373	-2.717	4.986		
17	123.98	121.31	125.82	0.366	-1.146	2.210		
1	40	1	1	20	1	2	1	2
2	40	20	1	1	12	69	12	26
3	40	20	20	27	12	69	12	26
4	1	20	40	1	12	68	12	27
5	1	20	40	1	12	68	12	27
6	1	20	40	1	12	68	12	27
7	40	1	1	38	12	68	12	27
8	40	1	1	38	12	68	12	27
9	40	1	1	38	12	68	12	27
10	40	1	1	38	12	68	12	27
11	40	1	1	38	12	68	12	27
12	40	1	1	20	12	68	12	27
13	40	1	1	20	12	68	12	27
14	40	1	1	20	12	68	12	27
15	40	1	1	38	12	69	12	26
16	40	1	1	38	12	69	12	26
17	40	1	1	38	42	2	12	25

Blok 7

In dit blok wordt een overzicht gegeven van de aanwezigheid van de verschillende eigenschapsnummers in de verschillende modellagen. Eigenschapsnummer 2 komt dus 2898 maal voor in laag 2, en 2898 maal in laag 3.

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
occurrences of ieig in layers:

```

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13		
1	2898	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
2	0	2898	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
3	0	2898	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
4	0	0	2898	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
5	0	0	0	2898	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
6	0	0	0	0	2898	0	0	0	0	0	0	0	0		
7	0	0	0	0	0	2898	0	0	0	0	0	0	0		
8	0	0	0	0	0	0	2898	0	0	0	0	0	0		
9	0	0	0	0	0	0	0	2898	0	0	0	0	0		
10	0	0	0	0	0	0	0	0	2898	0	0	0	0		
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898	0	0	0		
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898	0	0		
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898	0		
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898	0		
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898		
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898	
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2898

FLOW.UNF

functie

De FLOW.UNF file bevat het resultaat van de bewerking die door STYXZG is uitgevoerd. In de file wordt voor elke uitwisseling het uitwisselingsdebiet gegeven rekening houdend met het dispersieve/diffusieve debiet.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd (bevat voor elke uitwisseling achtereenvolgens segment-van, segment-naar, debiet en diffusief/dispersief debiet). Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

VOL.UNF

functie

De file VOL.UNF bevat de volumina en de eigenschapnummers van alle segmenten die in het model voorkomen.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

FLOWC.UNF

functie

De FLOWC.UNF file bevat het resultaat van de bewerking die door STYXZG is uitgevoerd. Deze file wordt aangemaakt in plaats van de file FLOW.UNF indien in de invoerfile het commando CHARON is opgenomen. Behalve het segment-van, segment-naar, debiet en diffusief/dispersief debiet wordt in deze file ook informatie over de oppervlakken en afstanden tussen de segmenten weggeschreven. De file wordt als invoer voor het chemische evenwichtsmodel CHARON gebruikt.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

FLOWF.UNF

functie

De file FLOWF.UNF bevat de informatie die naast de informatie uit de file FLOW.UNF nodig is om het FCT transportschema toe te passen.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

3.2.3 Foutmeldingen

nog te implementeren

3.3 STYXZ: stoftransport

3.3.1 Werking

STYXZ is het hart van het verspreidingsmodel. Dit programma voert de feitelijke transportberekening uit met behulp van de uitvoer van STYXZG en additionele invoer. Het resultaat van een berekening met STYXZ bestaat uit een film-file (*.FLM) waarin de concentraties in het systeem op een aantal tijdstippen worden gegeven, een controle file, een 'uitlogingsfile' en eventueel invoerfiles voor volgende berekeningen.

Het format van de film-file is zo gekozen dat de data door de naverwerkingsprogramma's zeer snel toegankelijk zijn. In de nabije toekomst zullen de uitvoerfiles onder de ODS van WL gebracht worden (Open Data Structuur), zodat deze ook met de standaard presentatiesoftware van WL (zoals het GPP, General Post Processing) verwerkt kunnen worden.

Evenals STYXZG wordt STYXZ gestuurd door commando's die in een invoerfile (*.INP) gegeven moeten worden. Ook hier worden alle de commando's tegelijk ingelezen, en achtereenvolgens afgewerkt.

Met STYXZ kan op vier verschillende manieren gerekend worden. Hierbij wordt de gebruikte optie bepaald door de voor deze optie specifieke commando's. De commando's van de verschillende opties mogen niet door elkaar gebruikt worden (BNDSO4 in combinatie met DOCOUT gaat dus mis). De volgende opties zijn mogelijk:

- één stof
Hier wordt de verspreiding van één stof beschouwd zonder dat rekening wordt gehouden met eventuele metabolietvorming, adsorptie aan DOC of redoxovergangen. Wel wordt rekening gehouden met adsorptie/desorptie, vorming/afbraak en diffusie/dispersie. Deze optie wordt bij STYXZ het meest toegepast.
- metabolieten
Hier wordt de verspreiding van een metaboliet berekend die uit een andere stof is gevormd, terwijl deze stof werd getransporteerd. De vorming van deze metaboliet wordt tijdsafhankelijk in het model ingevoerd. Het transport wordt verder op de normale wijze berekend rekening houdend met adsorptie/desorptie, vorming/afbraak en diffusie/dispersie. Het is mogelijk deze metaboliet gedurende het transport om te zetten in een volgende metaboliet waarvan de verspreiding vervolgens in een volgende berekening bepaald kan worden.
De voor de metaboliet-optie specifieke commando's zijn: METINP, METOUT en TSTMET

- **DOC**
Hier wordt de verspreiding van DOC gemodelleerd, op dezelfde wijze als de verspreiding van een enkele stof wordt gemodelleerd. Het is nu echter mogelijk een initiële hoeveelheid 'DOC-vormend' materiaal op te geven, waaruit volgens een op te geven snelheid DOC vrijkomt. De berekende verspreiding wordt tijdsafhankelijk in een 'DOC-veld' weggeschreven.
De voor de DOC-optie specifieke commando's zijn: DOCINP, DOCOUT en VERDOC.
- **redox**
Bij redox wordt de verspreiding van vier stoffen simultaan gemodelleerd (zuurstof, methaan, sulfaat, sulfide) bij de aanwezigheid van één vaste fase (ijzer). Tijdens de verspreiding reageren de stoffen met elkaar. Adsorptie en desorptie worden hierbij niet meer beschouwd, omdat dit voor deze stoffen niet relevant is. Zuurstof/methaan kan wel gevormd of afgebroken worden. Ook diffusie en dispersie worden beschouwd.
De voor de redox-optie specifieke commando's zijn: BNDOX, BNDSO4, BNDSUL, INTFE, INTOX, INTSO4, INTSUL.

3.3.2 Fileoverzicht

STYXZ maakt gebruik van de volgende in- en uitvoerfiles:

Tabel 3.6 Fileoverzicht voor het programma STYXZ

STYXZ: berekent het transport van verontreinigingen			
invoer		uitvoer	
commandofile	STYXZ.INP	controlefile	STYXZ.OUT
gegevens	FLOW.UNF VOL.UNF <i>FLOWF.UNF</i> <i>STYXZ.DOC</i> <i>STYXZ.MET</i>	resultaat	STYXZ.FLM STYXZ.LGT <i>STYXZ.DOC</i> <i>STYXZ.MET</i>

Bij het gebruik van STYXZ dient één invoerfile meegegeven te worden. Het startcommando ziet er dus altijd als volgt uit:

STYXZ invoer1

Hierbij bestaat invoer1 dus uit de file STYXZ.INP. De naam van deze invoerfile mag vrij gekozen worden. De namen van de *.UNF files liggen vast, en mogen niet veranderd worden. De namen van de *.DOC en *.MET file moeten in de invoerfile *.INP opgegeven worden. De files *.OUT, *.FLM en *.LGT krijgen automatisch dezelfde filenaam als de *.INP file. De namen van de uitvoerfiles *.DOC en *.MET moeten in de invoerfile *.INP gespecificeerd worden.

STYXZ.INP

Functie

In de file STYXZ.INP worden de chemische eigenschappen van het systeem, de concentraties aan verontreiniging, de rekestijd en tijdstappen, de te genereren uitvoer e.d opgegeven. De naam van de file mag vrij gekozen worden, waarbij de extensie INP wordt aangeraden.

Opbouw

De file is hetzelfde opgebouwd als de file STYXZG.ING, zodat de commando's in willekeurige volgorde mogen worden opgegeven. Ook de syntaxisafspraken zijn hetzelfde: de lengte van de commando's is maximaal 6 characters, achter een commando moet weer vanaf positie 13 een eventuele bijhorende waarde worden opgegeven. Indien waarden op een volgende regel worden opgegeven is het format vrij. Commentaarregels mogen vanaf regel 13 worden opgegeven. De invoer eindigt met het commando END.

De algemene regels voor de invoer van waarden voor segmenten, eigenschappen, randen of modellagen zijn de volgende (universeel voor STYXZ, STYXZG en vrijwel voor STYXZP):

segmenten	Segmenten worden meestal als groep van segmenten aangegeven (één segment komt niet zo vaak voor). Hierbij wordt het eerste segment en het laatste segment aangegeven. Indien er slechts één segment relevant is wordt twee maal dezelfde waarde gegeven. Indien 12 15 wordt gegeven betekent dit dat de parameter geldt voor de segmenten 12, 13, 14 en 15. Indien 164 164 wordt gegeven wordt alleen segment 164 bedoeld.
eigenschappen	Als een eigenschapnummer wordt bedoeld dan wordt dit nummer voorafgegaan door -1. Met -1 5 worden dus alle segmenten met eigenschapnummer 5 bedoeld.
randen	Een randnummer wordt aangegeven door één negatief getal. Met -9 wordt dus rand -9 bedoeld.
lagen	Komt niet in STYXZ voor.

De eenheid van de concentraties en de tijden die wordt gebruikt is vrij, behalve indien de redox-optie wordt gebruikt. Wel moeten de eenheden consistent zijn, wat betekent dat indien de concentraties in mg/l worden weergegeven de verdelingscoëfficiënt in kg/l moet worden opgegeven. Bij de redox-optie moeten alle concentraties in molen worden weergegeven (mol/m^3).

De volgende commando's kunnen gegeven worden:

- ANGLE** (12X,F12.0)
Soms zijn de assen van de schematisatie van een model gedraaid ten opzichte van de geografische assen. Deze verdraaiing moet hier opgegeven worden. Als dit commando niet wordt gegeven wordt een default verdraaiing van 0 graden aangenomen. De verdraaiingsrichting telt tegen de klok in.
- BNDOX** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER, REAL)
Met dit commando worden de randconcentraties (opgeloste concentraties) voor zuurstof toegekend (in mol/m³). Dit commando wordt alleen gebruikt bij de redox-optie. Een positieve waarde betekent een zuurstofconcentratie. Methaanconcentraties kunnen eventueel als negatieve waarden ingevoerd worden. Eerst wordt het randnummer gegeven waarvoor de concentratie geldt en vervolgens de concentratie (in molen per m³!).
- BNDSO4** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER, REAL)
Met dit commando worden de randconcentraties (opgeloste concentraties) voor sulfaat toegekend (in mol/m³). Dit commando wordt alleen gebruikt bij de redox-optie. Eerst wordt het randnummer gegeven waarvoor de concentratie geldt en vervolgens de concentratie.
- BNDSUL** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER, REAL)
Met dit commando worden de randconcentraties (opgeloste concentraties) voor sulfide toegekend (in mol/m³). Dit commando wordt alleen gebruikt bij de redox-optie. Eerst wordt het randnummer gegeven waarvoor de concentratie geldt en vervolgens de concentratie.
- BOUNDS** Afgesloten met END, regels free format (INTEGER, REAL)
Hier wordt de concentratie voor de modelranden gegeven met achtereenvolgens het randnummer (positief) en de opgeloste concentratie. Deze concentratie wordt gebruikt als invoerconcentratie indien door deze rand instroming plaatsvindt, en als 'diffusieconcentratie' indien diffusie over de rand plaatsvindt. Indien geen randconcentratie wordt opgegeven is deze gelijk aan nul. Indien in de redox-optie wordt gerekend stelt de waarde bij BOUNDS de methaanconcentratie in mol/m³ voor.
- CASE** (12X, A80)
Bij dit commando wordt de directory gespecificeerd waar alle uitvoerfiles terecht moeten komen. Indien deze opdracht niet wordt gegeven komen alle uitvoerfiles op de werkdirectory terecht.

- CHEMIS** Afgesloten met END, regels free format (1*INTEGER, 3*REAL) of (1*INTEGER, 4*REAL) als VERKOC wordt gebruikt
Na dit commando worden op de volgende regels de chemische eigenschappen voor *alle* in het model voorkomende eigenschapsnummers gegeven. Deze eigenschapsnummers zijn gekoppeld aan de eigenschapsnummers die in de volumina-file (*.ST1 of *.VOL) worden gegeven. Voor de verschillende eigenschapsnummers wordt achtereenvolgens gegeven: het betreffende eigenschapsnummer, de porositeit die bij dit eigenschapsnummer hoort, de verdelingscoëfficiënt van de verontreiniging (meestal gerelateerd aan het organische stofgehalte, in kg vast/m³), de soortelijke massa van de vaste fase (voor een watervoerend pakket in de orde van 2650 kg/m³). Deze waarden moeten voor alle eigenschappen gegeven worden. Indien de optie VERKOC gebruikt wordt om de verdelingscoëfficiënt in te voeren wordt achtereenvolgens gegeven: het betreffende eigenschapsnummer, de porositeit die bij dit eigenschapsnummer hoort, het gehalte aan organische koolstof (fractie), de soortelijke massa van de vaste fase, DOC gehalte porienwater (kg/m³).
- CONMAX** (12X,F12.4)
Maximale porienwaterconcentratie in het systeem. Deze waarde is meestal gelijk aan de hoogste initiele concentratie die wordt ingevoerd, tenzij met metabolieten of met afbraak/vorming wordt gewerkt. De waarde wordt uitsluitend bij de presentatie gedurende de berekening gebruikt.
- CONMIN** (12X,F12.4)
Minimale porienwaterconcentratie in het systeem. Deze waarde wordt zelden opgegeven, zodat de minimale waarde meestal gelijk aan nul is. Ook deze waarde wordt nog uitsluitend bij de presentatie gedurende de berekening gebruikt.
- CONTTA** (12X,I12)
Type legenda dat bij de weergave van de concentraties op het scherm gebruikt moet worden. De legenda wordt ten opzichte van CONMAX in 7 concentratiegroepen ingedeeld. Hierbij kunnen 4 verschillende default indelingen gebruikt worden (nummer 5 is een vrije keuze) met een accent op de hoge of op de lage concentraties:
- 1: 1.00-0.95, 0.95-0.90, 0.90-0.85, 0.85-0.75, 0.75-0.50, 0.50-0.20, <0.20
2: 1.00-0.85, 0.85-0.70, 0.70-0.55, 0.55-0.40, 0.40-0.25, 0.25-0.10, <0.10
3: 1.00-0.75, 0.75-0.50, 0.50-0.25, 0.25-0.10, 0.10-0.05, 0.05-0.02, <0.02
4: 1.00-0.50, 0.50-0.25, 0.25-0.05, 0.05-0.01, 0.01-0.002, 0.002-0.001, <0.001

- COORDI** (12X,2F12.0)
Hier kunnen de coördinaten van het nulpunt van de schematisatie worden opgegeven. Deze informatie wordt gebruikt om de gegevens geografisch correct weer te kunnen geven. Het nulpunt van de schematisatie ligt links boven (kolom- en rijnummer = 1). De eerste waarde die wordt opgegeven is de X-coördinaat en de tweede waarde is de Y-coördinaat. de X-coördinaat heeft in Nederland altijd een lagere getalswaarde dan de Y-coördinaat. De waarden moeten in meters worden opgegeven.
- DELTT** (12X,F12.4)
Minimale rekentijdstep. Deze tijd wordt alleen aangehouden als de door STYXZ berekende rekentijdstep groter is dan de opgegeven rekentijdstep.
- DOCINP** (12X,A60)
Bij berekeningen waar een apart DOC-verspreidingsveld moet worden meegenomen wordt bij deze optie de naam van dit DOC-veld meegegeven. Als deze optie wordt gebruikt moet ook de optie VERDOC worden meegegeven.
- DOCOUT**
Dit commando wordt uitsluitend gebruikt bij de berekening van de verspreiding van DOC (DOC-optie). Er wordt dan een file gemaakt waarin op een aantal tijdstippen de DOC-concentratie wordt weggeschreven. Deze file kan met de optie DOCINP bij een volgende berekening aangeroepen worden.
- FCT** (12X,A80)
Dit commando geeft opdracht met de Flux Corrected Transport methode te rekenen. Na dit commando kan de naam van de file met de gecorrigeerde flows opgegeven worden. Indien deze niet wordt opgegeven moet deze file met de naam 'FLOWF.UNF' op de werkdirectory aanwezig zijn. Om deze file aan te maken moet ook in STYXZG de opdracht FCT gegeven worden.
- FILE** (12X,A80)
Na dit commando kan de naam van een tweede commando-file gegeven worden. De commando's in deze file worden vervolgens als invoer van STYXZ afgewerkt. Deze optie is handig indien een aantal berekeningen wordt uitgevoerd waarbij telkens een groot deel van de commando-file hetzelfde is. Dit constante deel kan dan in de tweede commando-file worden verwerkt.
- FLOW** (12X,A80)
Achter dit commando moet de naam van ongeformatteerde file met de stromingen (flows) gegeven worden. Als dit command niet wordt gegeven moet deze file met de naam 'FLOW.UNF' op de werkdirectory aanwezig zijn.

- GRAPHS** Afgesloten met END, regels (A1,I20) (CHARACTER, INTEGER)
Met deze optie wordt aangegeven welke plaatjes er gedurende de berekening op het scherm getoond moeten worden. In de volgende regels wordt daartoe de te tonen modeldoorsnede (X,Y of Z) en het nummer van de doorsnede gegeven. Er kunnen maximaal zes doorsneden tegelijk getoond worden.
- IMPLIC** Als dit commando wordt gegeven wordt een impliciet rekenschema gebruikt. Dit betekent dat een veel grotere tijdstap kan worden gebruikt dan wanneer de expliciete methode wordt gebruikt (standaard), maar dat de berekening meer fouten bevat.
- INTFE** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, 1*REAL)
Na dit commando, dat alleen in de redox optie gebruikt wordt, moet de initiële ijzerconcentratie worden ingevoerd. Hoewel het reactieve ijzer uitsluitend in de vaste fase voorkomt, wordt de concentratie van het ijzer ingevoerd alsof deze in de oplossing voorkomt. Bij een vaste stofconcentratie van 25 gram ijzer per kg vaste fase moet dus bij een porositeit van 0.3 en een dichtheid van de vaste fase van 2500 een concentratie van 145.8 mol/m³ worden ingevoerd. De concentratie kan voor groepen van segmenten en voor eigenschapsnummers gedefinieerd worden.
- INTOX** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, 1*REAL)
Na dit commando (alleen mogelijk in redox-optie) moet de initiële zuurstof concentratie worden ingevoerd (positieve waarde). De concentraties moeten in mol/m³ worden ingevoerd.
De concentratie kan voor groepen van segmenten en voor eigenschapsnummers gedefinieerd worden.
- INTSO4** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, 1*REAL)
Na dit commando (alleen mogelijk bij redox-optie) moet de initiële sulfaatconcentratie worden ingevoerd (mol/m³). De concentratie kan voor groepen van segmenten en voor eigenschapsnummers gedefinieerd worden.
- INTSUL** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, 1*REAL)
Na dit commando (alleen mogelijk bij redox-optie) moet de initiële sulfideconcentratie worden ingevoerd (mol/m³).
De concentratie kan voor groepen van segmenten en voor eigenschapsnummers gedefinieerd worden.
- MAP** (12X,A20)
Naam van de file met de digitalisatie van de kaart-overlay, dit is in het algemeen een *.DIG file (zie beschrijving verderop).

METINP	(12X,A60) Indien met de vorming van een metaboliet wordt gerekend moet achter dit commando de naam van de file ingevuld worden waarin de metaboliet-concentraties in de tijd (via METOUT) zijn weggeschreven.
METOUT	(12X,A60) Indien met de vorming van een metaboliet wordt gerekend moet achter dit commando de naam van de file ingevuld worden waarin de metaboliet-concentraties in de tijd weggeschreven moeten worden. Dit commando moet in combinatie met het commando TSTMET gegeven worden.
NAMPOL	(12X,A10) Na dit commando kan met maximaal 10 tekens de naam van de verontreiniging opgegeven worden.
NOPICT	Er worden tijdens de berekening geen plaatjes naar het scherm weggeschreven. Deze optie kan vooral bij korte berekeningen een behoorlijke verkorting van de rekenduur betekenen, omdat het wegschrijven van plaatjes naar het scherm in dat geval een relatief groot gedeelte van de rekestijd vergt. Met behulp van deze optie kan ook gerekend worden op machines die niet beschikken over een passende grafische interface (workstations).
NPICTU	(12X,I12) Hier wordt aangegeven hoe vaak er uitvoer naar de film-file moet worden geschreven.
POLLUT	Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, 2*REAL) Hier wordt aangegeven welke segmenten een verontreiniging bevatten. De methode waarop segmenten worden aangegeven is boven beschreven. Er kunnen bij deze optie alleen waarden voor (groepen van) segmenten of eigenschapsnummers worden opgegeven. In de volgende regels worden eerst twee integers gegeven die de segmenten aanduiden waarvoor de concentratie geldt, vervolgens wordt de opgeloste(!) concentratie gegeven, gevolgd door een factor. Bij de redox-optie moeten bij dit commando de methaan-concentraties in mol/m ³ worden ingevoerd. De ingevoerde factor geeft aan hoe het volume van de betreffende segmenten moet worden aangepast. Deze aanpassing geldt alleen voor het volume, en niet voor de uitwisselingsoppervlakken of voor de afstand tot het centrum van het segment. De aanpassing van het volume wordt gebruikt om het modelvolume af te stemmen op het werkelijke volume, zodat de massa aan verontreiniging in het model correct is. Het commando moet worden afgesloten met END.

- PRODUC** (12X,3F12.4)
 Bij deze optie wordt een stof gevormd. Dit kan een organische microverontreiniging zijn, maar ook DOC (bij de DOC-optie) of methaan/zuurstof (bij de redox-optie). De formulering die hierbij gebruikt wordt is de volgende:
- $$dHH/dt = k1 * HH * t^{k2}$$
- waarin:
- HH hoeveelheid stof in het model (M)
 k1 afbraak coefficient (M/t)
 k2 afbraakcoefficient van de afbraakcoefficient (afname afbraak in de tijd)
- Achter het commando wordt de hoeveelheid materiaal die initieel aanwezig is (eenheden per m³ systeem), de afbraak/vormingssnelheid (k1, eenheid per tijdseenheid) en de afname van de afbraak/vorming (k2) gegeven. De initiële hoeveelheid is de totale hoeveelheid die omgezet kan worden. De stof wordt alleen gevormd in de segmenten waar initieel een concentratie aanwezig is.
- SOLPOL** Afgesloten met END, regels free format (2*INTEGER, 2*REAL)
 Dit is in feite hetzelfde commando als POLLUT. Alleen moet nu de concentratie in de vaste fase (massa/kg) gegeven worden in plaats van de opgeloste concentratie. De opbouw van het commando is verder identiek. SOLPOL kan niet bij de redox-optie gebruikt worden.
- In de volgende regels worden eerst twee integers gegeven die de segmenten aanduiden waarvoor de concentratie geldt, vervolgens wordt de concentratie in de vaste fase gegeven, gevolgd door een factor. De ingevoerde factor geeft aan hoe het volume van de betreffende segmenten moet worden aangepast. Deze aanpassing geldt alleen voor het volume, en niet voor de uitwisselingsoppervlakken of voor de afstand tot het centrum van het segment. De aanpassing van het volume wordt gebruikt om het modelvolume af te stemmen op het werkelijke volume, zodat de massa aan verontreiniging in het model correct is. Het commando moet worden afgesloten met END.
- STEADS** Bij deze optie worden een steady-state berekening uitgevoerd. Dit is alleen van toepassing voor systemen waar een vaste randconcentratie aanwezig is, zodat zich inderdaad een steady-state kan instellen. Deze methode is niet in combinatie met het FCT schema te gebruiken.
- TBEGIN** (12X,F12.4)
 Aanvangstijdstip voor de berekening in de tijdseenheid die voor de berekening wordt gebruikt (jaren/dagen).

THALF	(12X,F12.4) Halfwaardetijd in jaren (of dagen indien in dagen wordt gerekend) indien een afbreekbare stof wordt gemodelleerd. Deze halfwaardetijd (T_{half}) is te berekenen uit de afbraakconstante (C_{afbr} in fractie per jaar) met de formule $T_{half} = \ln 2 / C_{afbr}$
TIME	(12X,F12.4) Tijdstip tot waar gerekend moet worden in de tijdeenheid van het model (jaren/dagen).
TITLE	(12X,A60) Titel van de berekening die in de *.FLM file wordt weggeschreven.
TMPSPC	(12X,A20) Plaats waar scratch files geschreven worden (vanaf positie 13), verwijst bij voorkeur naar een virtuele RAM-schrijf indien voldoende geheugen beschikbaar is; default wordt hiervoor de directory gebruikt waarop de berekening wordt uitgevoerd (wordt tegenwoordig niet veel meer gebruikt). Deze optie kan gebruikt worden indien verschillende hydrologische files achtereenvolgens toegepast moeten worden (semi-dynamische hydrologie).
TRANSF	(12X,I12) Hier wordt de code gegeven voor de spiegeling en/of rotatie die moet worden uitgevoerd om de bij de waterkwantiteit gehanteerde schematisatie aan te sluiten op de schematisatie die in de presentatie van de resultaten wordt gebruikt; het uitgangspunt hierbij is nummering van links naar rechts, met de oorsprong in de linkerbovenhoek van het scherm; opties zijn 1: geen aanpassing (SFYNXZ, MODFLOW), 2: X en Y verwisselen; 3: X van rechts naar links; 4: Y van onder naar boven; 5: combinatie van 2 en 3; 6: combinatie van 2 en 4, 7 combinatie van 2, 3 en 4.
TSTMET	(12X,F12.4) Na dit commando moet de maximale fractie gegeven worden die in één reken-tijdstap afgebroken mag worden. De grootte van deze tijdstap is afhankelijk van de mobiliteit van de metaboliet.
VERDOC	(12X,F12.4) De verontreiniging zal aan het DOC adsorberen. Bij dit commando moet de verdelingscoëfficiënt voor de adsorptie aan DOC worden opgegeven in $m^3/kgDOC$. Deze verdelingscoëfficiënt wordt vaak gerelateerd aan de verdelingscoëfficiënt van POC middels de X_{DOC} (meestal orde 0.10).

- VERKOC** (12X,F12.4)
Hier wordt de Koc van de stof die gemodelleerd wordt opgegeven, bij voorkeur in m^3/kgOC . Indien het commando VERKOC wordt gegeven moet bij de optie CHEMIS de DOC concentratie van het porienwater als vierde parameterwaarde opgegeven worden. De tweede parameterwaarde wordt hier dan het organisch koolstofgehalte. Dit wordt bij de uitleg van CHEMIS verder beschreven.
- VOLUME** (12X,A80)
Achter dit commando moet de naam van ongeformateerde file met de volumina gegeven worden. Als dit command niet wordt gegeven moet deze file met de naam 'VOL.UNF' op de werkdirectory aanwezig zijn.
- XGRID**
Afgesloten met END, regels free format
Hier wordt de indeling van het rekengrid in de X-richting (dus kolommen bij MODFLOW) gegeven van links naar rechts. In de regels wordt aangegeven hoe vaak een gridafstand voorkomt, gevolgd door de waarde van deze gridafstand (in meters). Het opgegeven grid wordt gebruikt om de berekeningsresultaten op een geografisch correcte manier weer te geven.
- YGRID**
Afgesloten met END, regels free format
Hier wordt de indeling van het rekengrid in de Y-richting (dus rijen bij MODFLOW) gegeven van boven naar onder. In de regels wordt aangegeven hoe vaak een gridafstand voorkomt, gevolgd door de waarde van deze gridafstand (in meters). Het opgegeven grid wordt gebruikt om de berekeningsresultaten op een geografisch correcte manier weer te geven.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
de assen van het model zijn 23.5 graden gedraaid ten opzichte van de geografische assen
(tegen de klok in)
ANGLE      23.5
           de zuurstofconcentratie in het water dat over de randen -1, -2 en -3
           van het systeem binnenstroomt bedraagt respectievelijk 0.35, 0.26
           en 0.1 mol/m3
BND0X
1          0.35
2          0.26
3          0.1
END
           het water dat over de randen -2 en -3 van het systeem binnenstroomt
           heeft een sulfaatconcentratie van respectievelijk 0.12 en 0.95 mol/m3
BND04
2          0.12
3          0.95
END
           de sulfideconcentratie van water dat over de rand -4 binnenstroomt
           is 6 mol/m3
BND0SUL
4          6.0
END
           de concentratie van het water op de randen -1, -2, -3 en -4 is in
           alle gevallen 1.0 eenheden/m3; indien een redox berekening gemaakt
           wordt betekent dit dat de methaanconcentratie op deze randen gelijk is
           aan 1.0 mol/m3
BOUNDS
1          1.0
2          1.0
3          1.0
4          1.0
END
           de van de berekening uitvoer moet worden weggeschreven naar de
           directory D:\LIMBURG\SOM1
CASE      D:\LIMBURG\SOM1
           deze beschrijving geldt indien de optie VERKOC niet wordt gebruikt!
           het beschouwde systeem heeft 8 eigenschapnummers, waarbij de porositeit
           van het materiaal met eigenschapnummer 1 gelijk is aan 0.4, de verdelings
           coëfficiënt 132 (meestal m3/kg) en de dichtheid van de vaste fase 2650
           kg/m3 enz
CHEMIS
1          0.4          132.          2650.
2          0.4          132.          2650.
3          0.8          954.          2650.
4          0.3          5.           2650.
5          0.3          5.           2650.
6          0.3          5.           2650.
7          0.3          5.           2650.
8          0.3          5.           2650.
END
           deze beschrijving geldt indien de optie VERKOC wel wordt gebruikt!
           het beschouwde systeem heeft 8 eigenschapnummers, waarbij de porositeit
           van het materiaal met eigenschapnummer 1 gelijk is aan 0.4, het gehalte aan organisch
           koolstof is 0.02 (dus 2%, of 20 gram/kg), de dichtheid van de vaste fase is 2650 kg/m3
           en het gehalte aan DOC in het porienwater is 0.03 kg/m3 (30 mg/l)
CHEMIS
1          0.4          0.02          2650.          0.03
2          0.4          0.01          2650.          0.03
3          0.8          0.05          2650.          0.05
4          0.3          0.002         2650.          0.01
5          0.3          0.002         2650.          0.01
6          0.3          0.002         2650.          0.01
7          0.3          0.002         2650.          0.01
8          0.3          0.002         2650.          0.01
END

```


de maximale concentratie in het model bedraagt 25 eenheden per m³

CONMAX 25.0

de minimale concentratie in het model bedraagt 0 eenheden per m³

CONMIN 0.0

voor de weergave van de legenda van de concentraties wordt optie 2 gebruikt

CONTTA 2

de coördinaat van het nulpunt van het model is (173500, 515075) (in meters ten opzichte van het Rijksdriehoeksnetwerk)

COORDI 173500. 515075.

de maximale rekentijdstep is 0.15; deze waarde wordt door het model alleen gebruikt indien de door het model berekende maximale rekentijdstep groter is dan deze waarde; indien het model berekent dat de maximale rekentijdstep gelijk is aan 0.05, dan wordt die waarde gebruikt. Als een waarde van 0.0 wordt opgegeven kiest het model zijn eigen rekentijdstep

DELTT 0.15

het DOC-veld dat bij deze berekening wordt gebruikt is in de file DOCVELD1.DOC weggeschreven

DOCINP DOCVELD1.DOC

er moet een DOC-veld worden weggeschreven in de file DOCVELD2.DOC (er wordt dus een verspreiding van DOC berekend)

DOCOUT DOCVELD2.DOC

gebruik de Flux Corrected Transport rekenmethode; de file met de gecorrigeerde flows is C:\STROMING\FLOWF.UNF

FCT C:\STROMING\FLOWF.UNF

lees naam file waarin zich de rest van de invoercommando's bevindt

FILE FILENAAM.INP

de file met de flows is C:\STROMING\FLOW.UNF

FLOW C:\STROMING\FLOW.UNF

gedurende de berekening worden op het scherm de doorsneden X 12, X15 enz. getoond; hier mogen maximaal 6 verschillende doorsneden gekozen worden

GRAPHS

X 12

X 15

Z 1

Y 32

Y 35

Z 2

END

er moet een impliciete oplossingsmethode gebruikt worden in plaats van de (standaard) expliciete methode

IMPLIC

de initiele concentraties reactief ijzer bedragen voor segmenten met een eigenschapnummer van 4, 5 en 6 respectievelijk 0.0, 0.0 en 1.5 mol/m³ (dit zijn in feite de vaste stofconcentraties!)

INTFE

-1	4	0.
-1	5	0.
-1	6	1.5

END

de initiele concentraties zuurstof bedragen voor de segmenten met een eigenschapnummer van 4, 5 en 6 respectievelijk 10.0, 15.0 en 15.0 mol/m³

INTOX

-1	4	10.
-1	5	15.
-1	6	15.

END

de initiele concentraties sulfaat bedragen voor de segmenten met een eigenschapnummer van 4, 5 en van de segmenten 211 t/m 215 respectievelijk 2.3, 1.0 en 0.5 mol/m³

INTSO4

-1	4	2.3
-1	5	1.
211	215	0.5

END

de initiele concentraties sulfide bedragen voor de segmenten met een eigenschapnummer van 1, 2 en 3 respectievelijk 24.0, 10.0 en 0.3 mol/m³

INTSUL

-1	1	24.0
-1	2	10.0
-1	3	0.3

END

de geografische overlay is in de file KAART.DIG te vinden

MAP KAART.DIG
de stof waarmee gerekend wordt is gevormd bij een omzetting van een andere stof; de tijdsafhankelijke gevormde hoeveelheden staan in de file METABOLI.MET gegeven

METINP METABOLI.MET
de stof wordt gedurende de berekening omgezet in een metaboliet; de concentraties hiervan moeten in de file METABOLI.MET weggeschreven worden

METOUT METABOLI.MET
de naam van de verontreiniging waarmee gerekend wordt is 'lindaan'

NAMPOL lindaan
er worden gedurende de berekening geen plaatjes naar het scherm weggeschreven

NOPICT
in de film-file worden op 50 tijdstippen de concentraties in het systeem weggeschreven; bij een rekentijd van 1000 jaar worden de concentraties dus om de 20 jaar in de film-file weggeschreven

NPICTU 50
de initiele opgeloste concentraties bedragen voor de segmenten met eigenschap nummer 1 en 2 respectievelijk 0.65 en 1.3; het volume van deze segmenten wordt met een factor 1.0 vermenigvuldigd; de segmenten met een nummer van 205 t/m 208 en 311 t/m 318 hebben een initiele concentratie van respectievelijk 0.1 en 0.1; het volume van deze segmenten wordt met een respectievelijke factor van 2 of 1 vermenigvuldigd

POLLUT

-1	1	0.65	1.0
-1	2	1.3	1.0
205	208	0.1	2.0
311	318	0.1	1.0

END

in de segmenten waar een initiele verontreiniging aanwezig is, is per m³ systeem 2.5 eenheden stof aanwezig die met een snelheid van 0.025 per tijdseenheid wordt omgezet in de initiele verontreiniging

PRODUC 2.5 0.025 0.000
de concentratie in de vaste fase van alle segmenten met een eigenschapnummer van 1 is 12.3 (mg/kg), het volume van deze segmenten wordt met een factor van 1.0 vermenigvuldigd; de concentratie in de vaste fase voor de segmenten 205, 206, 207 en 208 is 1.6 (mg/kg) en het volume van deze segmenten wordt met een factor 2 vermenigvuldigd

SOLPOL

-1	1	12.3	1.0
-1	2	12.0	1.0
205	208	1.6	2.0
311	318	3.7	1.0

END

er moet een steady-state berekening worden uitgevoerd

STEADS

TBEGIN het begintijdstip voor de berekeningen is 0.0
0.
de halfwaardetijd voor afbraak is 15. tijdseenheden; de afbraaksnelheid is dus 0.046 per tijdseenheid

THALF 15.
de totale simulatieduur is 1000. tijdseenheden

TIME 1000.
de titel van de berekening is 'Voorbeeldberekening', deze wordt in de film-file weggeschreven

TITLE Voorbeeldberekening
tijdelijke rekenfiles worden op de directory D:\STYXZ\TMP weggeschreven

TMSPC D:\STYXZ\TMP
grid transformatie 5 wordt gebruikt (MODFLOW)

TRANSF 5
de tijdstap voor metabolietuitvoer is 0.01 tijdseenheid

TSTMET 0.01
de verdelingscoëfficiënt voor de adsorptie aan DOC is gelijk aan 5 m³/kgDOC

VERDOC 0.025
de verdelingscoëfficiënt voor de adsorptie aan OC is gelijk aan 0.25 m³/kgOC; bij deze optie hoort een aangepaste invoer bij CHEMIS!

VERKOC 0.25
de file met de volumina is C:\STROMING\VOLUME.UNF


```

VOLUME      C:\STROMING\VOLUME.UNF
             het grid is in de X-richting (kolommen) opgebouwd uit 3 segmenten van
             100., 4 van 50., 1 van 10. enz.

XGRID
  3 100.
  4  50.
  1  10.
 20   1.
 10 20.
  2 100.

END
             het grid is in de Y-richting (rijen) opgebouwd uit 2 segmenten
             van 100., 4 van 25., 20 van 1. enz.

YGRID
  2 100.
  4  25.
 20   1.
 10 25.
  2 100.

END
             Er volgen geen invoer instructies meer

END

```

FLOW.UNF

zie beschrijving STYXZG

FLOWF.UNF

zie beschrijving STYXZG

VOL.UNF

zie beschrijving STYXZG

STYXZ.MET

functie

De *.MET file wordt aangemaakt als in de invoerfile van STYXZ het commando METOUT wordt meegegeven. Dit betekent dat de stof die wordt gemodelleerd wordt omgezet in een metaboliet met de omzetsnelheid die bij het commando THALF wordt ingevoerd. De hoeveelheid metaboliet die elke tijdstap wordt gevormd wordt weggeschreven in de file *.MET. Deze file kan vervolgens gebruikt worden als invoer bij een volgende berekening waar de verspreiding van deze metaboliet wordt berekend. De naam van de file wordt dan bij het commando METINP opgegeven.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

STYXZ.DOC

functie

De file *.DOC bevat de DOC-concentraties in het systeem op een aantal tijdstippen. Deze file wordt aangemaakt als het commando DOCOUT wordt gegeven. De DOC-concentraties (het 'DOC-veld') worden gebruikt als invoer bij een berekening waar adsorptie van een verontreiniging aan DOC een rol speelt. De verspreiding van deze stof wordt dan dus in een dynamisch DOC-veld gemodelleerd. Bij een dergelijke berekening worden de DOC-concentraties op een aantal tijdstippen ingelezen, en wordt hiermee voor elk segment een verdelingscoëfficiënt (lees fractie opgelost) berekend. Met deze coëfficiënt wordt gerekend tot het volgende tijdstip van DOC-uitvoer waarna opnieuw de verdelingscoëfficiënten worden bepaald enz. Indien de *.DOC file als invoer gebruikt moet worden, moet dit met het commando DOCINP worden aangegeven. Bij dit commando wordt de naam van de *.DOC file opgegeven. Hierop volgend moet het commando VERDOC gegeven worden waarbij de verdelingscoëfficiënt tussen DOC en de oplossing wordt gegeven.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

STYXZ.OUT

functie

De file STYXZ.OUT wordt bij elke berekening die met STYXZ wordt uitgevoerd aangemaakt. De file dient als controle-file voor de berekening. In de file worden een aantal zaken weggeschreven:

- Een opsomming van alle commando's die in de invoerfile voorkomen met bijhorende invoerparameters. Met behulp van deze opsomming kan gecontroleerd worden of de invoer correct is verwerkt. Bij het commando CHEMIS wordt tevens de berekende fractie opgelost en de retardatie weergegeven.
- Eventuele foutmeldingen bij verkeerde invoercommando's, of bij onmogelijke combinaties van invoercommando's. Indien dit voorkomt wordt een berekening afgebroken.
- Informatie over de hoeveelheid segmenten die in het model voorkomen en over de massa verontreiniging in het systeem.
- Informatie over de gebruikte rekentijdstappen.
- Uitvoer informatie per tijdstap. Deze informatie is voor de verschillende typen berekeningen verschillend (één stof, DOC, metaboliet, redox).

opbouw

In de file kunnen achtereenvolgens drie blokken onderscheiden worden:

- een blok waarin de ingelezen instructies en parameters letterlijk worden weergegeven;
- een blok met informatie over de rekentijdstappen;
- een blok met eventuele aanvullende informatie over het verloop van de berekening. De informatie in dit blok is afhankelijk van de optie waarmee gerekend wordt: metabolieten, DOC of redox. Indien met één stof wordt gerekend is dit blok leeg.

voorbeeld

Blok 1

Het volgende voorbeeld bevat een klein gedeelte van het eerste informatieblok. Het is niet zinnig de rest van dit blok te tonen omdat deze identiek is aan de file STYXZ.INP. Wel is het aan het raden dit blok een keer grondig te inspecteren, om na te gaan of alle parameterwaarden goed zijn ingelezen.

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
CHEMISTRY (1 deklaag 2 wvp1, 3 wvp2, 4 wvp3, 5-16 depot, 17 dijk 18 dek onder
1      0.4000      9.5300      2650.0000
0.400000      9.53000      2650.00      0.263972E-04      15153.1

```

Onder het commando CHEMISTRY wordt eerste de informatie uit de STYXZ.INP file herhaald. Voor eigenschapnummer 1 is de porositeit dus 0.4, de verdelingscoëfficiënt 9.53 m³/kg en de dichtheid van de vaste fase 2650 kg/m³. In de volgende regel worden deze gegevens herhaald, en wordt vervolgens de fractie opgelost en de retardatie gegeven. De fractie opgelost wordt berekend met:

$$fo = \frac{1}{1 + 9.53 * (1-0.4) * 2650 / 0.4}$$

De retardatie is gelijk aan 0.4/fo.

Blok 2

In het tweede blok wordt informatie gegeven met betrekking tot de gebruikte rekentijdstep. Het volgende voorbeeld heeft betrekking op dit blok:

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
segments: 2193 exchanges: 4080 nx,ny,nz: 51 43 1
time: max dt, segm,vol is: 0.0000E+00 0.4230E+00 1581 0.2500E+03
time: max dt, segm,vol is: 0.0000E+00 0.3736E+03 1581 0.2208E+06
deltt used is: 0.7099E+03
ratio deltt: 0.1678E+04
time: 2500.000 start: 0.000 numb out: 100
deltt: 25.00000 per/out: 1 totstep: 100
original mass, volume 0.2706E+10 0.2024E+05

```

De eerste regel geeft aan dat het gebruikte model bestaat uit 2193 segmenten, die 4080 uitwisselingen hebben. Het aantal x, y en z elementen is respectievelijk 51, 43 en 1 (een tweedimensionaal model). Regel twee geeft aan dat de maximale tijdstepgrootte gebaseerd op de stroomsnelheid van water gelijk is aan 0.423 tijdseenheid. Het beperkende segment is segment 1581 met een totaal volume van 0.25E+03 m³. Als het transport van verontreiniging beschouwd wordt (regel 3) is nog steeds segment 1581 limiterend, maar is de toegestane tijdstep 373.6 tijdseenheid. Het adsorberende volume van dit segment is 0.2208E+06.

Het model mag uiteindelijk een tijdstep van 709.9 tijdseenheden gebruiken (regel 4), wat veroorzaakt wordt doordat de in regel 3 berekende tijdstep gebaseerd is op een ongeveer twee maal te hoog segmentsdebiet. De gebruikte tijdstep is 1678 maal zo groot als de tijdstep die op basis van de verblijftijd van water toegestaan zou zijn (regel 5). Dit is dus de factor in de tijdswinst die in het model bereikt wordt door met de totale massa in plaats van met de opgeloste massa te rekenen.

In regel 6 wordt vermeld dat een periode van 2500 jaar doorgerekend moet worden, te beginnen bij 0. Er moet 100 maal uitvoer gegeven worden. Dit betekent dat elke 25 jaar uitvoer gegeven moet worden (regel 7). Omdat de uitvoertijdstep kleiner is dan de toegestane rekentijdstep, wordt er 1 rekenperiode per uitvoertijdstep gedaan (per/out). In het totaal worden er 100 rekentijdstappen gedaan. De uiteindelijke rekentijdstep wordt in dit geval dus bepaald door het aantal maal dat uitvoer gegeven moet worden.

Het systeem bevat oorspronkelijk $0.2706E+10$ eenheden verontreiniging. Het volume van de segmenten waarvoor een concentratie is opgegeven bedraagt $0.2024E+05$ m³.

Blok 3, DOC

Dit voorbeeld heeft betrekking op het derde blok dat alleen geproduceerd wordt indien de DOC optie wordt gebruikt. Er zijn slechts een aantal regels weergegeven. In dit geval wer DOC geproduceerd en afgebroken. Het eerste getal geeft het tijdstip, het tweede de in het tijdsinterval gevormde hoeveelheid, en het derde de nog aanwezige hoeveelheid uitgangsmateriaal.

```
.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
time, prod ; 25.00000 0.00023 0.97531
time, prod ; 50.00000 0.00023 0.95122
time, prod ; 75.00000 0.00022 0.92774
time, prod ; 100.00000 0.00022 0.90483
```

Blok 3, metaboliet

Dit voorbeeld heeft betrekking op het derde blok dat alleen geproduceerd wordt bij de metaboliet-optie. In dit voorbeeld wordt een metabolietconcentratie ingelezen, waarvan de hoeveelheid tot $t=40.42$ stijgt. De tijdstap die bij de berekening in die periode gebruikt wordt is constant. Als de metabolietconcentraties gaan dalen mag een grotere tijdstap gebruikt worden, die bij elke tijdstap opnieuw wordt geevalueerd.

De tijdstap die initieel werd gebruikt wordt in de eerste regel gegeven. Vervolgens wordt de initiele massa gegeven die nul is (de stof moet nog gevormd worden). Daarna wordt voor elk tijdstip na $t=40.42$ de nieuw berekende tijdstap en de totale massa in het systeem gegeven.

```
.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
          XH,TIME out metab is: 0.1733E+01 1.44271
original mass, volume 0.1000E-04 0.1000E-04
time, new tout: 0.4042E+02 0.1855E+01 0.2352E+10
time, new tout: 0.4226E+02 0.1892E+01 0.2345E+10
time, new tout: 0.4417E+02 0.1931E+01 0.2334E+10
time, new tout: 0.4610E+02 0.1970E+01 0.2320E+10
```

Blok 3, redox

In dit voorbeeld wordt het derde blok beschreven dat alleen wordt aangemaakt als met de redox-optie wordt gerekend. In dit blok wordt voor elk tijdstip de massa van achtereenvolgens methaan, zuurstof, sulfaat, sulfide en ijzer gegeven voor het hele systeem.

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
time: masses:  0.00  0.1296E+06  0.0000E+00  0.2321E+07  0.0000E+00  0.4002E+07
time: masses:  2.50  0.1287E+06  0.0000E+00  0.2319E+07  0.3269E+03  0.4001E+07
time: masses:  5.00  0.1280E+06  0.0000E+00  0.2317E+07  0.5972E+03  0.4001E+07
time: masses:  7.50  0.1273E+06  0.0000E+00  0.2315E+07  0.8248E+03  0.4000E+07
time: masses: 10.00  0.1266E+06  0.0000E+00  0.2314E+07  0.1019E+04  0.4000E+07

```

STYXZ.FLM

functie

In de file *.FLM ('film-file') worden de concentraties in het systeem op het gewenste aantal tijdstippen weggeschreven. Het aantal maal dat informatie wordt weggeschreven wordt bepaald met het commando NPICTU in de invoerfile van STYXZ. Behalve de concentraties wordt ook aanvullende informatie van de berekening weggeschreven, zoals de segmentindeling, de volumina van de segmenten en de hoeveelheid stof die over de modelranden is verdwenen. De informatie in de file kan zichtbaar gemaakt worden met het programma STYXZF (zie verderop). Met het programma STYXZP kunnen de getalswaarden uit de file onttrokken worden.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

STYXZ.LGT

functie

De file *.LGT wordt ook wel de 'uitloog-file' genoemd. In de file wordt voor elk tijdstip waarop een film-file wordt weggeschreven de hoeveelheid en de flux van de stof in het depot en in het systeem weggeschreven. Het depot is hierbij dat deel van het systeem waar initieel verontreiniging aanwezig was (waar dus bij het commando CONCEN een concentratie opgegeven is). De informatie in de file wordt gebruikt om na te gaan hoe de uitloging van een depot en het systeem verloopt. De file wordt niet beschreven (wel aangemaakt) als met met de redox-optie wordt gerekend, omdat de balans dan voor 5 stoffen weggeschreven zou moeten worden.

De informatie die in de file wordt gegeven kan ook met het programma STYXZP verkregen worden.

opbouw

De eerste regel van deze file is een commentaarregel, die altijd hetzelfde is. De waarden van de parameters die in deze regel worden opgesomd worden eronder gegeven. In de volgende regels wordt achtereenvolgens gegeven:

- 1: het tijdstip van wegschrijven;
- 2: de totale massa stof in het depot (dus volume depot*concentratie);
- 3: de massa in het depot als percentage van de initiele massa in het depot;
- 4: de flux uit het depot op het tijdstip van wegschrijven;
- 5: de totale massa stof in het systeem; deze is initieel gelijk aan de hoeveelheid in het depot;
- 6: de massa in het systeem als percentage van de initiele massa in het systeem;
- 7: de massaflux uit het systeem op het moment van wegschrijven.

voorbeeld

```
.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
tijd    depot  %dep  dflux  systeem %syst  sflux
.0      .7373E+10 100.000 .0000E+00 .7373E+10 100.000 .0000E+00
23.0    .7176E+10 97.206 .8941E+07 .7371E+10 99.971 .9333E+05
46.1    .6990E+10 94.814 .7653E+07 .7368E+10 99.943 .8909E+05
enz.
```

Het depot bevat in dit voorbeeld initieel $0.7373E+10$ eenheden verontreiniging. Op $T=23.0$ bevat het depot nog $0.7176E+10$ eenheden verontreiniging hetgeen 97.206% van de initiele hoeveelheid is. Er heeft dus een uitloging van 2.794% plaatsgevonden. De massaflux uit het systeem is op dat tijdstip $0.8941E+07$ eenheden per tijdseenheid. In het systeem zijn na 23.0 jaar nog $0.7371E+10$ eenheden verontreiniging aanwezig, hetgeen 99.971% is van de initiele hoeveelheid. Er is in 23.0 tijdseenheden dus 0.029% van de hoeveelheid verontreiniging uit het systeem verdwenen (afbraak of uitstroming over de systeemranden). De massaflux uit het systeem is op dat tijdstip $0.9333E+05$ eenheden per tijdseenheid.

3.2.3 Foutmeldingen

nog te implementeren

3.3 STYXZF: grafische presentatie (oud)

3.3.1 Werking

STYXZF is een interactief programma waarmee de informatie uit de *.FLM file op het scherm zichtbaar gemaakt kan worden. Hierbij worden de concentraties van één of meer modelvlakken op één of meer tijdstippen als contouren op het scherm geplot, eventueel met een kaartje als overlay. De legenda kan eventueel handmatig aangepast worden. Bovendien kan de getoonde informatie in een uitvoerfile weggeschreven worden, en kan het getoonde plaatje in een grafische file (*.PIC) worden weggeschreven.

STYXZF is interactief, zodat de commando's via het scherm gegeven moeten worden in plaats van via een invoer-file. Als het programma gestart wordt verschijnt een opkomst scherm met een opsomming van de mogelijke commando's. Met behulp van de pijltjes-toetsen (↑ en ↓) moet een commando gekozen worden. Vervolgens moeten tijdstippen en modelvlakken gekozen worden door op de juiste positie waarden in te vullen, gevolgd door <ENTER>. Na nogmaals <ENTER> gegeven te hebben verschijnt het gekozen plaatje op het scherm.

Er kunnen drie manieren van presentatie gekozen worden:

- Meerdere modelvlakken op één tijdstip
Hier kunnen 1-6 modelvlakken gekozen worden waarvan de concentraties op één tijdstip gepresenteerd worden. Er mogen tegelijk X-, Y- en Z-vlakken gekozen worden.
- Eén modelvlak op meerdere tijdstippen
Hier wordt één vlak gekozen waarvan de concentraties op maximaal 6 verschillende tijdstippen gepresenteerd worden.
- Meerdere modelvlakken in een continue film
Hier kunnen 1-6 modelvlakken gekozen worden en kan gekozen worden tussen welke tijdstippen een film getoond moet worden. Met deze optie is het mogelijk de stof door het systeem te zien bewegen.

Het getoonde plaatje is als volgt opgebouwd. Er worden, afhankelijk van de keuze maximaal 6 modelvlakken of tijdstippen getoond. Onder elk plaatje wordt vermeld om welk modelvlak of tijdstip het gaat. Als voor modelvlakken is gekozen wordt rechts onderin het tijdstip weergegeven, als voor tijdstippen is gekozen wordt rechts onderin het modelvlak gegeven. De bijhorende legenda wordt rechts gegeven, waarbij de concentraties als delen van CONMAX (opgegeven in de invoerfile van STYXZ) worden weergegeven. Onder het plaatje wordt de naam van de invoerfile van STYXZG gegeven en de titel van de berekening (ingevoerd in STYXZ bij het commando TITLE).

Indien met de redox-optie wordt gerekend bevat de *.FLM file informatie voor vijf stoffen in plaats van voor één stof. Deze informatie wordt weggeschreven in de vorm van verschillende Z-vlakken. Als een model 3 Z-vlakken bevat (dus 3 modellagen) dan wordt in de *.FLM file voor 15 Z-vlakken informatie weggeschreven. Z 1 bevat dan de methaanconcentraties van laag 1 (Z=1) Z 2 de methaanconcentraties van laag 2, Z 3 van laag 3, Z 4 de sulfaatconcentraties van laag 1 enz.

De volgende menuschermen zijn beschikbaar:

Hoofdkeuze

Dit keuzeschermbiedt de volgende opties:

- | | |
|------------------|---|
| planes, 1 timest | Als deze optie wordt gekozen verschijnt eerst het vlakkeuze scherm. Hier moeten 1-6 vlakken aangegeven worden (<ENTER>). Na nogmaals <ENTER> verschijnt het tijdkeuze scherm waar één tijdstip ingevuld moet worden (<ENTER>). Het default tijdstip is 0.0. Na nogmaals <ENTER> wordt het gewenste plaatje op het scherm getoond. |
| 1 plane, times | Als deze optie wordt gekozen verschijnt eerst het tijdkeuze scherm. Hier moeten 1-6 tijdstippen gekozen worden (<ENTER>). Na nogmaals <ENTER> verschijnt het vlakkeuze scherm waar één modelvlak ingevuld moet worden (<ENTER>). Nadat de keuze is gemaakt verschijnt na nog een <ENTER> het gewenste plaatje op het scherm. |
| planes, continue | Als deze optie wordt gekozen verschijnt eerst het vlakkeuze scherm. Hier moeten 1-6 vlakken aangegeven worden (<ENTER>). Na nogmaals <ENTER> verschijnt het tijdkeuze scherm waar nu een begintijd en een eindtijd ingevuld moeten worden. Vervolgens worden voor de gekozen vlakken het concentratie-verloop tussen deze tijdstippen getoond. De vertoning kan worden afgebroken door <ALT> S in te typen. |
| borders | Bij deze optie verschijnt het legendakeuze menu, en kan een nieuwe legenda ingesteld worden. |
| gwrite option on | Als deze optie wordt gekozen wordt elk plaatje dat op het scherm getoond wordt in een *.PIC file weggeschreven. |
| gwrite opt. off | Deze optie stopt het wegschrijven van plaatjes in *.PIC files. Deze optie staat default op off. |
| stop program | Bij deze keuze wordt STYXZF gestopt, en komt de gebruiker terug in de omgeving waaruit het programma werd gestart (DOS/WINDOWS). |

Vlakkeuze

Het vlakkeuze scherm is zeer eenvoudig van opbouw. In een regel aan de bovenzijde wordt het aantal X-, Y- en Z-vlakken gegeven waaruit het model bestaat en de tijd die doorgerekend is. Daaronder wordt zes maal een X, Y en Z gegeven. Indien een vlak gekozen moet worden moet met de pijltjestoetsen (↑ en ↓) naar het gewenste soort vlak gelopen worden. Vervolgens wordt het vlaknummer ingevoerd, besloten met een <ENTER>. Op deze wijze kunnen maximaal 6 vlakken gekozen worden. Indien nogmaals <ENTER> wordt ingevoerd wordt dit scherm verlaten.

Tijdkeuze

Aan de bovenzijde van het tijdkeuze scherm wordt het tijdstip gegeven tot waar gerekend is. Vervolgens wordt afhankelijk van de keuze die voorafgaand aan de tijdkeuze is gemaakt:

- na 'planes, 1 timest': één vakje waar het te kiezen tijdstip kan worden ingevoerd, gevolgd door <ENTER>
- na '1 plane, times': zes hokjes waarin 1-6 tijdstippen ingevuld moeten worden, telkens besloten met <ENTER>
- na 'planes, continue': twee hokjes waarin een begin- en een eindtijd ingevuld moeten worden, telkens besloten met <ENTER>

Nadat de keuzen zijn gemaakt moet nogmaals <ENTER> worden ingevoerd om dit scherm te verlaten.

Legendakeuze

Bij de legendakeuze kan een eigen legenda ingevoerd worden, of kan een reeds ingestelde legende gekozen worden. Het scherm heeft onder elkaar cont 1, cont 2, ..., cont 7 en igr. Met de keuze cont wordt een grenswaarde ingesteld. Deze waarde moet als fractie worden ingevoerd. Deze fractie wordt toegepast op CONMAX (zie invoer STYXZ).

Bij igr kan een standaardindeling gekozen worden, waarbij dezelfde mogelijkheden voorhanden zijn als bij STYXZ:

- 1: 1.00-0.95, 0.95-0.90, 0.90-0.85, 0.85-0.75, 0.75-0.50, 0.50-0.20, <0.20
- 2: 1.00-0.85, 0.85-0.70, 0.70-0.55, 0.55-0.40, 0.40-0.25, 0.25-0.10, <0.10
- 3: 1.00-0.75, 0.75-0.50, 0.50-0.25, 0.25-0.10, 0.10-0.05, 0.05-0.02, <0.02
- 4: 1.00-0.50, 0.50-0.25, 0.25-0.05, 0.05-0.01, 0.01-0.002, 0.002-0.001, <0.001

Indien een standaardindeling gekozen wordt verschijnen de waarden niet in het legendakeuze scherm. Default wordt in het legendakeuzeschermbij igr 5 ingevuld, hetgeen betekent dat de gebruiker eigen grenzen in mag stellen. Ook hier geldt dat een ingevoerde waarde bevestigd wordt met <ENTER>, en dat het menu verlaten wordt met een extra <ENTER>.

Bijzondere toetsen

Een aantal toetsaanslagen heeft in STYXZF een bijzondere functie:

<ENTER> bevestigingscommando, moet gegeven worden na invoer van een tijdstip/vlak

<ALT> S stopcommando gedurende de vertoning van een film

D deze toets moet direct nadat de uitvoer van een plaatje begint (dus nog voordat het plaatje op het scherm verschijnt) worden ingetoetst; de informatie die naar het scherm wordt gestuurd zal dan in de file STYXZF.OUT worden weggeschreven

T met deze toets wordt opdracht gegeven een uitvoerfile aan te maken die met behulp van het presentatiepakket TEKAL zichtbaar gemaakt kan worden; het voordeel van deze presentatie is dat de uitvoer professioneel oogt en goed in een zwart/wit rapport is te verwerken; de toets moet op dezelfde wijze als de 'D' gehanteerd worden

3.3.2 Fileoverzicht

De volgende files zijn bij STYXZF relevant, waarbij de cursief weergegeven files niet altijd gebruikt hoeven te worden.

Tabel 3.7 Fileoverzicht voor het programma STYXZF

STYXZF: toont de resultaten van een STYXZ-berekening op het scherm			
invoer		uitvoer	
gegevens	STYXZ.FLM <i>KAART.DIG</i>	resultaat	<i>STYXZF.OUT</i> <i>STYX001.PIC</i>

Bij het gebruik van STYXZF dient één invoerfile meegegeven te worden. Het startcommando ziet er dus altijd als volgt uit:

STYXF invoer1

Hierbij bestaat invoer1 dus uit de file STYXZ.FLM. De naam van deze invoerfile mag vrij gekozen worden. De naam van de file *.DIG moet in de invoerfile *.INP van STYXZ gespecificeerd worden. Deze filenaam is in de *.FLM file opgenomen. De naam van de uitvoerfile STYXZF.OUT ligt vast.

STYXZ.FLM

functie

De file *.FLM ('film-file') is de hoofdfile voor het programma STYXZF. De file wordt aangemaakt door STYXZ. In de file worden de concentraties in het systeem op het gewenste aantal tijdstippen weggeschreven. Het aantal maal dat informatie wordt weggeschreven wordt bepaald met het commando NPICTU in de invoerfile van STYXZ. Behalve de concentraties wordt ook aanvullende informatie van de berekening weggeschreven, zoals de segmentindeling, de volumina van de segmenten en de hoeveelheid stof die over de modelranden is verdwenen.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

KAART.DIG

functie

In deze file worden de coördinaten van de omgrenzing van het gemodelleerde gebied gegeven en wordt de ligging van relevante kaartlijnen in geografische coördinaten gegeven. Deze file kan als overlay voor een plaatje gebruikt worden, indien er in de *.FLM file naar verwezen wordt. Dit wordt bereikt door in de invoer van STYXZ bij het commando 'KAART' de naam van de *.DIG file mee te geven. De naam mag vrij gekozen worden, al wordt de extensie 'DIG' aangeraden.

opbouw

De file is 'vector-georiënteerd' hetgeen betekent dat de lijninformatie wordt gegeven door een aantal punten waardoor deze lijn moet lopen. Bij de presentatie van deze lijn wordt vervolgens tussen de opgegeven punten een lijn getrokken. Dit betekent dat bij de weergave van vloeiende lijnen de punten niet al te ver uit elkaar moeten liggen.

De file bestaat uit blokken van punten, waarbij elk blok een lijnstuk voorstelt. Elke regel stelt een punt voor waarbij achtereenvolgens een kleurcode, de X-coördinaat en de Y-coördinaat wordt gegeven. De X loopt hierbij van links naar rechts (oost naar west) op het scherm, de Y van onder naar boven (zuid naar noord) (volgens het geografische systeem). De kleurcode wordt in STYXZ niet gebruikt. De blokken zijn van elkaar gescheiden door middel van een scheidingsregel. Achter elke regel mag commentaar worden ingevoerd. Het format is vrij.

De file moet beginnen met de coördinaten van de hoekpunten van het modelgebied. Deze worden linksom draaiend (tegen de klok in) opgegeven, beginnend in de linker onderhoek. Het blok eindigt bij dezelfde coördinaat als waar het begon. Na dit blok worden de lijnstukken gegeven. Deze mogen tot buiten het modelgebied reiken, en worden door STYXZF automatisch op de modelranden afgesneden.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
0.0000    0.0000    0.0000  omlijning
0.0000   1880.0000    0.0000
0.0000   1880.0000   266.7600
0.0000    0.0000   266.7600
0.0000    0.0000    0.0000
9999.0000    0.0000    0.0000  westdijk
0.0000    550.0000   265.5000
0.0000    583.0000   258.0000
0.0000    560.0000   254.5000
0.0000    540.0000   254.0000
0.0000    500.0000   256.0000
0.0000    550.0000   265.5000
9999.0000    0.0000    0.0000  oostdijk
0.0000   1340.0000   265.5000
0.0000   1310.0000   258.0000
0.0000   1330.0000   254.5000
0.0000   1360.0000   254.0000
0.0000   1380.0000   256.0000
0.0000   1340.0000   265.5000
9999.0000    0.0000    0.0000  depot
0.0000    550.0000   265.5000
0.0000    583.0000   258.0000
0.0000    724.0000   224.7000
0.0000   1157.0000   224.7000
0.0000   1310.0000   258.0000
0.0000   1340.0000   265.5000
9999.0000    0.0000    0.0000

```

De eerste vijf regels in dit voorbeeld zijn de hoekpunten van het model: linksonder is (0.0000, 0.0000), rechtsonder is (1880.0000, 0.0000), rechtsboven is (1880.0000, 266.7600) en linksboven is (0.0000, 266.7600). Er wordt afgesloten met de oorsprong. Achter de eerste regel is commentaar ('omlijning') opgenomen. De kleurcode van de omlijning is 0.0.

De volgende regel (regel 6) is een scheidingsregel die moet beginnen met 9999.00. De volgende waarden zijn niet relevant. De regels 7 tm 12 geven het contour van de 'westdijk'. De kleurcode is weer 0.0. Het blok dat de westdijk voorstelt wordt met scheidingsregel 13 besloten. Vanaf regel 14 wordt het contour van de oostdijk gegeven enz.

STYXZF.OUT

functie

De file STYXZF.OUT (naam ligt vast) wordt bij elke run van STYXZF aangemaakt. Een eventueel reeds bestaande file met dezelfde naam wordt overschreven. In de file worden een groot aantal 'test' parameters weggeschreven. Deze worden vooral gebruikt om te controleren of alle parameters goed in de *.FLM file zijn terecht gekomen. Vaak worden bij verschillende versies van STYXZ en STYXZF andere parameters weggeschreven. Omdat deze parameters niet van belang zijn voor de gebruiker van STYXZ, wordt er verder niet op ingegaan.

Behalve de parameters worden ook de in STYXZF opgevraagde concentraties in deze file weggeschreven. Hiervoor is opdracht gegeven met de toets D (zie beschrijving STYXZF). Alle opgevraagde informatie wordt onder elkaar weergegeven. Deze informatie kan gebruikt worden om de concentratie in een segment terug te zoeken, of om de concentratiegegevens met een ander grafisch pakket (GIS) zichtbaar te maken.

opbouw

In de file wordt begonnen met een aantal regels waarin een groot aantal parameterwaarden wordt weggeschreven. Vervolgens komt in blokken de informatie die in STYXZF is opgevraagd. Elk blok begint met een aanduiding van het tijdstip en het vlak. De informatie in het blok wordt op dezelfde wijze uitgevoerd als dat deze informatie op het scherm wordt gepresenteerd. De regels lopen dus van links naar rechts, en de eerste regel begint links boven. Indien er kruisjes (*****) worden gegeven betreft het een niet bestaand element. De reden hiervan is dat de concentraties van deze elementen een waarde van -999.0 hebben, hetgeen niet het format van de uitvoer past.


```

37 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
38 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
39 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
40 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
41 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
42 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
43 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
tijd =      500.0000 data:
z-axis, plane: 1 time: 500.
1***** 0.000*****
2***** 0.000 0.000 0.000

```

De eerste 35 regels van dit voorbeeld bestaan uit parameterwaarden, voornamelijk met betrekking tot de opbouw van het grid. Op regel 36 wordt het tijdstip (0.00) gegeven waarvoor het volgende concentratieblok geldt. Op de volgende regel wordt het modelvlak gegeven, met nogmaals het tijdstip. Vervolgens volgen 43 regels van elk 51 waarden. Teneinde de file hier te kunnen presenteren zijn van deze 51 waarden telkens slechts 12 waarden gegeven. Het model bestond dus uit 51 kolommen en 43 rijen (en 1 laag, hetgeen dus betekent dat het een 2-dimensionaal model is).

De concentraties in het eerste blok zijn vrijwel allemaal gelijk aan nul. Bij kolom 1, rij 1 is een waarde van ***** ingevuld (is -999.), hetgeen betekent dat dit segment niet bestaat (lucht). De concentratie van het segment met kolomnummer 2 en rijnummer 7 is 0.120, enz. Na het eerste blok wordt een tweede blok gegeven (vlak 1, tijdstip 500.0) waarvan alleen de eerste twee regels zijn weergegeven.

STYXZ001.PIC

functie

De file *.PIC wordt aangemaakt als in het hoofdkeuze menu de optie 'gwrite option on' wordt gekozen. De naamgeving wordt vervolgens door STYXZ geregeld (*STYXZ001.PIC, STYXZ002.PIC enz.). Elk plaatje dat op het scherm getoond wordt, wordt ook als PIC-file weggeschreven. Deze plaatjes kunnen gebruikt worden bij animaties.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

3.3.3 Foutmeldingen

nog te implementeren

3.4 STYXZMAP: grafische presentatie onder WINDOWS

STYXZMAP is een nieuw programma waarmee de resultaten van een verspreidingsberekening op het scherm zichtbaar gemaakt kunnen worden. Het programma is gebaseerd op het pakket MAPPER dat door WL is ontwikkeld voor geografische presentaties. STYXZMAP werkt onder WINDOWS. De functionaliteit is groter dan die van STYXZF en de opzet van STYXZMAP is flexibeler. Voor nieuwe gebruikers is het aan te raden STYXZMAP te gebruiken in plaats van STYXZF.

STYXZMAP werkt geheel interactief. Evenals bij STYXZF kan het concentratieverloop in alle vlakken getoond worden, waarbij meerdere vlakken tegelijk geselecteerd kunnen worden. Bovendien bestaat de mogelijkheid twee berekeningen met elkaar te vergelijken door een tweede venster met STYXZMAP te openen. Behalve het verloop van de concentratie in een vlak kan ook de concentratie voor elk segment getoond worden. Als achtergrond kan bij een presentatie een deel van de topografische kaart van Nederland (1:250000 weergegeven worden).

3.4.1 Werking

STYXZMAP is opgezet volgens de WINDOWS regels. Dit betekent dat het scherm vergroot of verkleind kan worden via iconen aan de bovenrand van het scherm. Bovendien kan met het scherm geschoven worden enz. Het werken met STYXZMAP vergt enige kennis van WINDOWS.

De menukeuzen zijn opgenomen in de keuzebalk aan de bovenrand van het scherm. Deze biedt de items 'File', 'Edit', 'View', 'Options', 'Window' en 'Help'. Bovendien is er nadat een file is gekozen links onder deze balk een keuzemogelijkheid voor de te tonen vlakken aanwezig en kan rechts onder de balk het tijdstip ingesteld worden.

Onder de volgende menu-items zijn de volgende opties beschikbaar:

File

Open Data	Met behulp van deze optie wordt de STYXZ-filmfile gekozen. Het keuzemenu spreekt voor zich.
Open View	Bij deze optie kan op dezelfde wijze als bij 'Open Data' een kaart gekozen worden die als achtergrond voor de presentatie gebruikt wordt. Deze kaart moet voor elk venster opnieuw als achtergrond gekozen worden.
Save View	Bij deze optie wordt de getoonde figuur als een 'MAP'-file opgeslagen. De naam hiervoor is hetzelfde als de naam van de film-file.
Save View As	Bij deze optie wordt de getoonde figuur onder een naam naar keuze opgeslagen.
Exit STYXZ Graphics	Het presentatieprogramma wordt verlaten. Dit is ook mogelijk door het presentatiewindow te sluiten (knop links bovenaan scherm).

Edit

Copy Graphics Met deze optie kan de getoonde figuur in een file opgeslagen worden, of naar een printer gestuurd worden.

Copy Data Met deze optie worden de getoonde data naar een datafile weggeschreven. Dit is handig wanneer het nodig is de exacte concentraties van alle cellen te kennen. Deze waarden kunnen vervolgens bijvoorbeeld in een ander grafisch programma worden ingelezen.

Data Ranges Hier worden de legenda-waarden ingesteld met behulp van een keuze menu. Binnen dit menu kan de minimale en de maximale waarde van de legenda gekozen worden, kan gekozen worden voor een stijgende of een dalende legenda, kan het aantal legendaklassen ingesteld worden en kunnen de waarden, kleuren en labels van de verschillende klassen aangepast worden. De aangepaste legenda kan in principe bewaard worden.

Map Layers De kaart waarop de berekeningsresultaten gepresenteerd worden bestaat uit een aantal kaartlagen. Elke laag stelt een onderwerp op de kaart voor (wegen, boomgaarden, water e.d.). Met behulp van deze optie kunnen de te presenteren lagen geselecteerd worden, en kan ingesteld worden hoe de verschillende lagen op het scherm terecht komen (dikte lijnen, kleur). Voor de instelling is een keuzemenu aanwezig.

View

Zoom In Met deze optie wordt ingezoomd. Nadat de optie is gekozen wordt de muis gekoppeld aan een kruisje. Dit moet vastgeklikt worden, waarna een vierkant vanuit dit punt ontstaat. Er wordt ingezoomd op het getekende vierkant.

Zoom Out Met deze optie kan uitgezoomd worden. de werking is in principe hetzelfde als bij het inzoomen.

Zoom All Met deze optie wordt het totale oppervlak van de kaart die zich achter de presentatie bevindt gepresenteerd. Hoe groter de kaart, hoe groter het gepresenteerde gebied.

Move Window Hier kan het kaartje binnen de window waarin het zich bevindt verplaatst worden.

Previous View Met deze optie wordt het vorige kaartje teruggehaald.

Options

Highlight Selection

Show Status Bar Met deze optie wordt aan de onderrand van het scherm de zgn. 'status bar' weergegeven. Aan de rechterkant hiervan is de positie van de muis zichtbaar in geografische coördinaten. Hiermee kunnen bijvoorbeeld afmetingen binnen een presentatie gemeten worden.

Z-Scaling Bij de dwars doorsneden wordt de Z-as (diepte) van boven naar beneden weergegeven. Omdat de afstand in de Z-richting veel kleiner is dan die in de X- of de Y-richting wordt dus vaak een schaling toegepast, teneinde een bruikbaar plaatje te krijgen. De mate van schaling kan bij deze optie opgegeven worden (default 10).

Display Raw data De presentatie wordt default voorzien van een interpolatie. Dit betekent dat het verloop van de concentraties vloeiend wordt gemaakt door de waarden van de verschillende gridcellen te interpoleren. Als de ruwe gegevens bekeken moeten worden kunnen deze met de optie 'Raw Data' zichtbaar gemaakt worden.

Window

New X-Plane Hiermee wordt een nieuw X-vlak (kolom) gekozen. Het kolomnummer kan op de balk net onder de menubalk ingesteld worden. Hier wordt ook de geografische positie van deze kolom getoond. Er kunnen in het totaal meer dan 10 verschillende vlakken gekozen worden. Als een vlak niet langer getoond hoet te worden kan deze gesloten worden ('Close').

New Y-Plane Hiermee wordt een nieuw Y-vlak (rij) gekozen. Het rijnummer kan op de balk net onder de menubalk ingesteld worden. Hier wordt ook de geografische positie van deze rij getoond. Er kunnen in het totaal meer dan 10 verschillende vlakken gekozen worden. Als een vlak niet langer getoond hoet te worden kan deze gesloten worden ('Close').

New Z-Plane Hiermee wordt een nieuw Z-vlak (laag) gekozen. Het laagnummer kan op de balk net onder de menubalk ingesteld worden. Hier wordt ook de geografische positie van deze laag getoond. Er kunnen in het totaal meer dan 10 verschillende vlakken gekozen worden. Als een vlak niet langer getoond hoet te worden kan deze gesloten worden ('Close').

Show Legend Met deze optie wordt de legenda zichtbaar gemaakt.

Cascade Bij deze optie worden de gekozen vlakken achter elkaar op het scherm geplaatst als een soort kaartenbak.

Tile Horizontal

Bij deze keuze worden de gekozen vlakken onder elkaar afgebeeld. Als te veel vlakken zijn gekozen worden de vlakken in meerdere rijen onder elkaar geplaatst.

Tile Vertical

Bij deze keuze worden de gekozen vlakken naast elkaar afgebeeld. Als te veel vlakken zijn gekozen worden de vlakken in meerdere lagen naast elkaar geplaatst.

Arrange Icons*Help*

Deze optie is nog niet geïmplementeerd.

3.4.2 Fileoverzicht

nog te implementeren

3.4.3 Foutmeldingen

nog te implementeren

3.5 STYXZP: getalsmatige analyse

3.5.1 Werking

Het programma STYXZP geeft de mogelijkheid informatie uit de *.FLM file te kwantificeren. Het programma kan met een invoerfile gestuurd worden maar kan ook interactief via een gebruiksmenu toegepast worden. Bij interactief gebruik kunnen de resultaten direct op het scherm geplott worden. Bovendien worden de resultaten in verschillende files weggeschreven. De commando's die interactief en in een invoerfile gegeven worden zijn in principe hetzelfde. Toch zullen beide werkwijzen beschreven worden. Indien het programma interactief gebruikt wordt schrijft STYXZP de gebruikte commando's automatisch in de file TMP.POP weg, die vervolgens als invoerfile gebruikt kan worden.

STYXZP kan informatie leveren voor afzonderlijke segmenten, voor groepen van segmenten, voor eigenschapnummers, voor groepen van eigenschapnummers en voor modelranden. Bovendien is het mogelijk aan segmenten of groepen van segmenten een nieuw eigenschapnummer toe te kennen, zodat op vrijwel alle manieren informatie uit de *.FLM file onttrokken kan worden. Voor segmenten kan de concentratie op elk tijdstip bepaald worden.

Voor eenheden die uit meerdere segmenten bestaan kan de gemiddelde concentratie, de maximale concentratie, de relatieve massa, de absolute massa, het relatieve volume waarin de concentratie tussen bepaalde grenzen ligt, het absolute volume waarin de concentratie tussen bepaalde grenzen ligt en de uitloging bepaald worden. Voor de modelranden kan de geaccumuleerde hoeveelheid die over die rand het model is uitgestroomd worden opgevraagd.

Bij gebruik van STYXZP moet eerst worden aangegeven voor welk deel van het systeem informatie opgevraagd moet worden. Vervolgens moet aangegeven worden welke informatie benodigd is. Bij deze keuzen komen telkens vaste combinaties van commando's voor. Indien bepaalde commando's niet worden gegeven stopt het programma, of worden default-waarden gebruikt. De volgende commando's zijn met elkaar verbonden (als dus VOLABS wordt gebruikt moet voor RANGES en PROPER een keuze zijn gemaakt, enz.):

VOLABS:	RANGES, PROPER
VOLREL:	RANGES, PROPER
CONCEN:	SEGMENT
MEANCO:	LIMIT, PROPER
MAXCON:	PROPER
VOLCON:	LIMIT, PROPER
LEACHI:	IDEPOT
MASSAB:	PROPER
MASSRE:	PROPER
MASSBN:	BOUNDS
FLUXBN:	BOUNDS

STYXZP heeft twee belangrijke schermen: het hoofdmenu waar een analyseopdracht gegeven kan worden, en een specificatiemenu waar de gewenste segmenten, eigenschapnummers, grenzen e.d. opgegeven worden. Indien een analyse wordt gemaakt moet dus eerst via het specificatiemenu een selectie van segmenten e.d. gemaakt worden, en moet vervolgens via het hoofdmenu een analyseopdracht gegeven worden. Vanuit het hoofdmenu kan op elk tijdstip teruggegaan worden naar het specificatiemenu om een keuze aan te passen.

Specificatiemenu

Dit menu wordt via het hoofdmenu bereikt via de opdracht 'NUMBER'. Het menu biedt de volgende keuze mogelijkheden (voor voorbeelden wordt verwezen naar de beschrijving van de *.POP file). Indien geen keuze wordt gemaakt wordt een default waarde gehanteerd.

- RANGES** Default 6 ranges, 0.0000, 0.0010, 0.0050, 0.0100, 0.0200 en 0.0500.
Bij ranges worden de grenzen ingesteld die gebruikt worden bij de analyse van het volume dat binnen een bepaalde concentratierange ligt. Deze optie kan bijvoorbeeld gebruikt worden om na te gaan welke volumina tussen bepaalde normconcentraties liggen.
Achter het commando staat een getal dat aangeeft hoeveel grenzen er gebruikt worden. Nadat dit getal eventueel aangepast is verschijnen de verschillende grenzen. De waarde hiervan is als fractie van CONMAX (zie invoer STYXZ) gegeven. Indien dit gewenst is kunnen de waarden aangepast worden. Indien de waarden A, B, C en D opgegeven worden betekent dit dat de concentratiegrenzen bij de opties VOLABS en VOLREL liggen van A-B, B-C, C-D en >D.
- LIMIT** Default is de waarde 0.0010.
Indien een gemiddelde concentratie voor een groep van segmenten wordt berekend moeten alleen de segmenten beschouwd worden waarin de concentratie hoger is dan een bepaalde drempelwaarde. Indien deze drempelwaarde niet gegeven wordt is de gemiddelde concentratie immers afhankelijk van de omvang van de gekozen groep (een grotere groep bevat in het algemeen een relatief groter aantal segmenten met een lage concentratie en dus een lagere gemiddelde concentratie).
De drempelconcentratie moet achter LIMIT ingevuld worden.
- SEGMENT** Default wordt er 1 segment gekozen (segment 1).
Achter dit commando moet het aantal segmenten ingevuld worden waarop de uit te voeren analyse betrekking heeft. Nadat het aantal is ingevuld moeten de segmentnummers gegeven worden.
- BOUNDS** Default wordt er 1 rand gekozen (rand -1).
Achter dit commando moet het aantal modelranden ingevuld worden waarop de uit te voeren analyse betrekking heeft. Nadat het aantal is ingevuld moeten de randnummers gegeven worden (positief).
- PROPER** Default worden er zes eigenschapnummers gekozen: 1 t/m 6.
Achter dit commando moet het aantal eigenschapnummers ingevuld worden waarop de uit te voeren analyse betrekking heeft. Nadat het aantal is ingevuld moeten de eigenschapnummers gegeven worden.
- CONVVO** Default wordt een waarde van 1.0 gebruikt.
Hier wordt een vermenigvuldigingsfactor ingevoerd die op de volumina wordt toegepast.
- CONVCO** Default wordt een waarde van 1.0 gebruikt.
Hier wordt de vermenigvuldigingsfactor voor de concentraties ingevuld. Alle concentraties in de *.FLM-file worden met deze factor vermenigvuldigd alvorens een analyse wordt uitgevoerd.

- IDEPOT** Default is het depotnummer 1.
Als de uitloging van een deel van het systeem geanalyseerd moet worden kan dit deel als depot aangeduid worden. Allereerst moet aan dit deel een segmentnummer worden toegekend, waarna dit segmentnummer achter dit commando moet worden ingevuld.
- SEGTOP** Geen default-waarden.
Met de optie SEGTOP kan aan (groepen van) segmenten eenzelfde eigenschapnummer worden toegekend. Na dit commando moet het eigenschapnummer worden ingevoerd. Vervolgens kunnen maximaal 10 combinaties van segmenten ingevoerd worden. Deze worden ingevoerd in de vorm van A tot B waarbij A het eerste segment van de groep is en B het laatste. Indien slechts één segment aangegeven wordt is A gelijk aan B.

Hoofdmenu

Het hoofdmenu bevat de volgende keuzen:

- NUMBER** Met deze optie wordt het specificatiemenu bereikt. Nadat een specificatie is gemaakt komt het hoofdmenu automatisch terug.
- HEADER** Hier kan een tekst ingevuld worden. Deze wordt als titel in het eerste record van de uitvoerfiles weggeschreven.
- VOLABS** Bij deze optie wordt voor één of meer gekozen segmentsnummers het absolute volume bepaald waarin de concentratie zich tussen de via RANGES opgegeven concentraties bevindt. Het absolute volume is in het algemeen een volume in m³. Dit volume is het systeemvolume, en moet dus met de porositeit vermenigvuldigd worden om het watervolume te verkrijgen.
- VOLREL** Bij deze optie wordt voor één of meer gekozen segmentsnummers het relatieve volume bepaald waarin de concentratie zich tussen de via RANGES opgegeven concentraties bevindt. Het relatieve volume wordt uitgedrukt ten opzichte van het totale volume van het gemodelleerde systeem en is dus een dimensieloze fractie.
- CONCEN** Deze optie wordt in combinatie met de opdracht SEGMENT gebruikt om het concentratieverloop in een selectie van segmenten te bepalen.
- MEANCO** Met behulp van MEANCO wordt de gemiddelde concentratie voor de gekozen eigenschapnummers bepaald. De drempelconcentratie moet hierbij met LIMIT opgegeven worden. De gemiddelde concentratie is een gewogen gemiddelde en wordt dus bepaald door de som van de producten van concentratie en volume te delen door het totale volume van het betreffende eigenschapnummer. De resultaten worden voor elk gekozen eigenschapnummer weggeschreven.
- MAXCON** Bij deze optie wordt voor de geselecteerde eigenschapnummers op elk tijdstip de maximale concentratie bepaald. De maxima worden voor elk geselecteerd eigenschapnummer weggeschreven.

- VOLCON** Bij deze optie wordt voor de deelverzameling van de gekozen eigenschapsnummers het volume bepaald dat boven de met LIMIT opgegeven drempelconcentratie ligt, en wordt het oppervlakte, de gemiddelde en de maximale concentratie bepaald. Deze optie kan gebruikt worden om na te gaan wat het volume van elk eigenschapsnummer is dat tot boven een norm is verontreinigd.
- LEACHI** Bij LEACHI wordt voor een gekozen depot (IDEPOT) de uitloging bepaald op dezelfde wijze als in de *.LGT file (zie STYXZ).
- MASSAB** Met MASSAB wordt op elk tijdstip de totale absolute massa stof in elk van de geselecteerde eigenschapsnummers bepaald en weggeschreven.
- MASSRE** Met MASSRE wordt op elk tijdstip de totale relatieve massa stof in elk van de geselecteerde eigenschapsnummers bepaald en weggeschreven. De massa wordt gerelateerd aan de totale massa die in het systeem aanwezig is.
- MASSBN** MASSBN geeft voor alle gekozen modelranden het cumulatieve verloop van de massa in de tijd. Deze massa is dus de hoeveelheid stof die het model via die rand verlaten heeft. Met behulp van deze optie kan een totaalbalans van de massa in het systeem gemaakt worden.
- FLUXBN** FLUXBN geeft voor alle gekozen modelranden het verloop van de flux in de tijd. Deze flux is dus de hoeveelheid stof die het model via die rand verlaten heeft. Met behulp van deze optie kan een totaalbalans van de massa in het systeem gemaakt worden.
- END** Als END wordt gekozen wordt STYXZP verlaten.

De uitvoer van de opdrachten die in het hoofdmenu gegeven worden wordt weggeschreven in uitvoerfiles. De extensie van deze files is afhankelijk van de opdracht. bij de volgende commando's horen de volgende file-extensies:

VOLABS:	*.PLV
VOLREL:	*.PLV
CONCEN:	*.PLC
MEANCO:	*.PLM
MAXCON:	*.PLX
VOLCON:	*.PLL
LEACHI:	*.PLG
MASSAB:	*.PLB
MASSRE:	*.PLB
MASSBN:	*.PBM
FLUXBN:	*.PBF

Alle opdrachten die via het interactieve menu gegeven worden schrijft het programma weg in de file TMP.POP. Deze file kan als een gewone POP-invoerfile gebruikt worden.

Grafieken

Nadat een optie van het hoofdmenu is afgewerkt verschijnt het grafiekmenu. Hiermee kan het resultaat van de zojuist uitgevoerde analyse op het scherm zichtbaar gemaakt worden. In de grafieken wordt op de X-as de tijd geplott, en op de Y-as de concentratie, hoeveelheid e.d. De assen van de grafieken kunnen op een aantal manieren gekozen worden:

scaled-expanded	voor elke lijn wordt de Y-as apart geschaald, zodat elke lijn optimaal wordt weergegeven
logar-expanded	logaritmische schaling voor de Y-as
linear expanded	lineaire schaling voor de Y-as
logar	logaritmische schaling voor de Y-as
linear	lineaire schaling voor de Y-as

Het grafiek-menu wordt met de <ESC> toets verlaten.

3.5.2 Fileoverzicht

De files die bij STYXZP gebruikt worden zijn in het volgende overzicht opgesomd. De cursief weergegeven files hoeven niet altijd voor te komen.

Tabel 3.8 Fileoverzicht voor het programma STYXZP

STYXZP: geeft een getalsmatige analyse van de resultaten van een STYXZ-berekening			
invoer		uitvoer	
commandofile	<i>STYXZ.POP</i>		
gegevens	<i>STYXZ.FLM</i>	resultaat	<i>TMP.POP</i> <i>STYXZ.PBM</i> <i>STYXZ.PBF</i> <i>STYXZ.PLB</i> <i>STYXZ.PLC</i> <i>STYXZ.PLG</i> <i>STYXZ.PLL</i> <i>STYXZ.PLM</i> <i>STYXZ.PLV</i> <i>STYXZ.PLX</i>

Indien STYXZP interactief wordt gebruikt moet één invoerfile meegegeven worden. Het startcommando ziet er dan als volgt uit:

STYXZP invoer1

Hierbij bestaat invoer1 dus uit de file STYXZ.FLM. De naam van deze invoerfile mag vrij gekozen worden.

Indien STYXZP niet interactief wordt gebruikt, bijvoorbeeld in batch verwerking, moeten twee invoerfiles meegegeven worden. Het startcommando ziet er dan als volgt uit:

```
STYXZP invoer1 invoer2
```

Hierbij bestaat invoer1 dus uit de file STYXZ.FLM, en invoer2 uit een STYXZ.POP file. De naam van beide files mag vrij gekozen worden.

Bij de uitvoerfiles liggen de extensies vast, en wordt als voorvoegsel de naam van de *.FLM file gebruikt.

STYXZP.POP

functie

De file *.POP biedt de mogelijkheid alle opdrachten die interactief aan STYXZP gegeven kunnen worden via een file in te voeren. Het voordeel van deze methode is dat de files in batch verwerkt kunnen worden, en dat niet telkens dezelfde keuzen gemaakt moeten worden. Deze file wordt als tweede argument bij het aanroepen van STYXZP meegegeven. De file wordt tegenwoordig automatisch aangemaakt als het programma interactief toegepast wordt. De naam is in dat geval TMP.POP, waarbij de commando's hetzelfde zijn als bij STYXZ.POP.

opbouw

De algemene regels voor de invoer van waarden voor segmenten, eigenschappen, randen of modellagen zijn de volgende (universeel voor STYXZ en STYXZG, enigszins afwijkend bij STYXZP):

segmenten	Segmenten worden meestal als groep van segmenten aangegeven (één segment komt niet zo vaak voor). Hierbij wordt het eerste segment en het laatste segment aangegeven. Indien er slechts één segment relevant is wordt twee maal dezelfde waarde gegeven. Indien 12 15 wordt gegeven betekent dit dat de parameter geldt voor de segmenten 12, 13, 14 en 15. Indien 164 164 wordt gegeven wordt alleen segment 164 bedoeld.
eigenschappen	Als een eigenschapnummer wordt bedoeld dan wordt dit nummer voorafgegaan door -1. Met -1 5 worden dus alle segmenten met eigenschapnummer 5 bedoeld.
randen	Een randnummer wordt aangegeven door één positief getal. Met 9 wordt dus rand -9 bedoeld.

In STYXZP zijn de volgende commando's mogelijk:

BOUNDS	regel free format (INTEGER, n*REAL) Achter dit commando moet op de volgende regel het aantal geselecteerde randen gegeven worden, gevolgd door de randnummers (positief). Het commando gaat vooraf aan MASSBN.
CONCEN	Deze optie wordt in combinatie met de opdracht SEGMENTEN gebruikt om het concentratieverloop in een selectie van segmenten te bepalen.
CONVCO	volgende regel free format (REAL) Na dit commando wordt in de volgende regel de vermenigvuldigingsfactor voor de concentraties ingevuld. Alle concentraties in de *.FLM-file worden met deze factor vermenigvuldigd alvorens een analyse wordt uitgevoerd.
CONVVO	volgende regel free format (REAL) Na dit commando wordt een vermenigvuldigingsfactor ingevoerd die op de volumina wordt toegepast.
END	Verplicht eindcommando dat <i>alleen</i> aan het eind van de *.POP file voor mag komen.
FLUXBN	FLUXBN geeft voor alle gekozen modelranden het de uitgaande flux op de verschillende tijdstappen. Deze flux is dus de hoeveelheid stof die het model via die rand per tijdseenheid verlaat. Met behulp van deze optie kan een totaalbalans van de massa in het systeem gemaakt worden. De betreffende randen moeten van tevoren geselecteerd zijn met het commando BOUNDS.
FORMAT	regels (A20) (CHARACTER) Na het commando FORMAT moeten in de volgende twee regels twee formats gegeven worden. Het eerste format is het format waarmee de regels in de uitvoerfile weggeschreven worden, en het tweede format is het format waarmee de kopregel van de uitvoerfile wordt weggeschreven. Deze formats moeten op elkaar aansluiten, teneinde een nette file te krijgen. Het is dus niet handig om voor de kopregel een format van ('tijdstip',75I5) op te geven en voor de rest van de regels een format van (F4.2, 75F7.2). Beter is om voor de regels dan een format van bijvoorbeeld (F8.1, 75F5.3) op te geven.
HEADER	(6X,A20) (CHARACTER) Direct na het commando HEADER kan een tekst ingevuld worden. Deze wordt als titel in het eerste record van de uitvoerfiles weggeschreven.
IDEPOT	regel free format Als de uitlogging van een deel van het systeem geanalyseerd moet worden kan dit deel als depot aangeduid worden. Allereerst moet aan dit deel een segmentnummer worden toegekend, waarna dit segmentnummer achter dit commando moet worden ingevuld. Er kan slechts één waarde ingevoerd worden.

- LEACHI** Bij LEACHI wordt voor een gekozen depot (IDEPOT) de uitlogging bepaald op dezelfde wijze als in de *.LGT file (zie STYXZ).
- LIMIT** volgende regel free format (REAL)
Indien een gemiddelde concentratie voor een groep van segmenten wordt berekend moeten alleen de segmenten beschouwd worden waarin de concentratie hoger is dan een bepaalde drempelwaarde. Indien deze drempelwaarde niet gegeven wordt is de gemiddelde concentratie immers afhankelijk van de omvang van de gekozen groep (een grotere groep bevat in het algemeen een relatief groter aantal segmenten met een lage concentratie en dus een lagere gemiddelde concentratie).
De drempelconcentratie moet in de volgende regel na LIMIT ingevuld worden. Indien geen waarde wordt ingevuld wordt default 0.001 als drempelwaarde gebruikt. LIMIT is relevant voor de commando's MEANCO en VOLCON.
- MASSAB** Met MASSAB wordt op elk tijdstip de totale absolute massa stof in elk van de geselecteerde eigenschapnummers bepaald en weggeschreven. De gewenste eigenschapnummers moeten van te voren met PROPER ingevoerd zijn.
- MASSBN** MASSBN geeft voor alle gekozen modelranden het cumulatieve verloop van de massa in de tijd. Deze massa is dus de hoeveelheid stof die het model via die rand verlaten heeft. Met behulp van deze optie kan een totaalbalans van de massa in het systeem gemaakt worden. De betreffende randen moeten van te voren geselecteerd zijn met het commando BOUNDS.
- MASSRE** Met MASSRE wordt op elk tijdstip de totale relatieve massa stof in elk van de geselecteerde eigenschapnummers (PROPER) bepaald en weggeschreven. De massa wordt gerelateerd aan de totale massa die in het systeem aanwezig is.
- MEANCO** Met behulp van MEANCO wordt de gemiddelde concentratie voor gekozen eigenschapnummers (PROPER) bepaald. De drempelconcentratie moet hierbij met LIMIT opgegeven worden. De gemiddelde concentratie is een gewogen gemiddelde en wordt dus bepaald door de som van de producten van concentratie en volume te delen door het totale volume het betreffende eigenschapnummer. De resultaten worden voor elk gekozen eigenschapnummer weggeschreven.
- MAXCON** Bij deze optie wordt voor de geselecteerde eigenschapnummers (PROPER) op elk tijdstip de maximale concentratie bepaald. De maxima worden voor elk geselecteerd eigenschapnummer weggeschreven.
- PROPER** regel free format (n*INTEGER)
Achter dit commando moet op de volgende regel het aantal eigenschapnummers ingevuld worden waarop de uit te voeren analyse betrekking heeft, gevolgd door de verschillende eigenschapnummers. De keuze die met PROPER wordt gedaan gaat vooraf aan de opdrachten MASSAB, MASSRE, MAXCON, MEANCO, VOLABS, VOLCON en VOLREL.

- RANGES** regel free format (INTEGER, n*REAL)
Bij ranges worden de grenzen ingesteld die gebruikt worden bij de analyse van het volume dat binnen een bepaalde concentratierange ligt. Deze optie kan bijvoorbeeld gebruikt worden om na te gaan welke volumina tussen bepaalde normconcentraties liggen. Achter het commando moet op de volgende regel het aantal grenzen ingevuld worden, gevolgd door de onderwaarde van deze grenzen.
- De waarde hiervan is als fractie van CONMAX (zie invoer STYXZ) gegeven. Indien dit gewenst is kunnen de waarden aangepast worden. Indien de waarden A, B, C en D opgegeven worden betekent dit dat de concentratiegrenzen bij de opties VOLABS en VOLREL liggen van A-B, B-C, C-D en >D. Het commando moet voor de commando's VOLABS en VOLREL gegeven worden.
- SEGMEN** regel free format (n*INTEGER)
Na dit commando moet in de volgende regel het aantal segmenten gegeven worden waarvoor uitvoer gewenst is, en moeten vervolgens de segmentnummers gegeven worden. Dit commando gaat vooraf aan CONCEN.
- SEGTOP** afgesloten met -1 -1 -1, regels free format (3*INTEGER)
Met de optie SEGTOP kan aan (groepen van) segmenten eenzelfde eigenschapnummer worden toegekend. Na dit commando moeten op de volgende regels de groepen aangegeven worden, met bijhorende segmentnummer. Per regel wordt er dus een waarde A en een waarde B gegeven, gevolgd door een eigenschapnummer. A is het eerste segment waarvoor dit eigenschapnummer geldt, en B het laatste (als B gelijk is aan A wordt slechts één segment bedoeld). Het commando wordt met de regel -1 -1 -1 afgesloten.
- VOLABS** Bij deze optie wordt voor een deelverzameling van één of meer gekozen segmentnummers (PROPER) het absolute volume bepaald waarin de concentratie zich tussen de via RANGES opgegeven concentraties bevindt. Het absolute volume is in het algemeen een volume in m³. Dit volume is het systeemvolume, en moet dus met de porositeit vermenigvuldigd worden om het watervolume te verkrijgen.
- VOLCON** Bij deze optie wordt voor de deelverzameling van de gekozen eigenschapnummers (PROPER) het volume bepaald dat boven de met LIMIT opgegeven drempelconcentratie ligt. Bovendien wordt het oppervlak van deze deelverzameling gegeven en wordt de gemiddelde en maximale concentratie die in de deelverzameling wordt bereikt bepaald. Deze optie kan gebruikt worden om na te gaan wat het volume van elk eigenschapnummer is dat tot boven een norm is verontreinigd.
- VOLREL** Bij deze optie wordt voor een deelverzameling van één of meer gekozen segmentnummers (SEGMEN) het relatieve volume bepaald waarin de concentratie zich tussen de via RANGES opgegeven concentraties bevindt. Het relatieve volume wordt uitgedrukt ten opzichte van het totale volume van het gemodelleerde systeem en is dus een dimensieloze fractie.

voorbeeld

In dit voorbeeld zijn alle mogelijke opdrachten opgenomen. Deze zijn in blokken verdeeld die telkens met de opdracht 'HEADER' beginnen. In elk blok wordt eerst aangegeven op welke segmenten/eigenschapsnummers de bewerking wordt toegepast, en wat eventuele grenzen zijn. Vervolgens wordt de bewerking gegeven. Het voorbeeld is zeer uitgebreid. In de praktijk worden meestal slechts enkele blokken in een *.POP file opgenomen.

```

.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|
HEADER      concentraties (blok 1)
SEGMEN
  4 188 250 275 340
CONVCO
  0.15
CONCEN
HEADER      uitloging (blok 2)
FORMAT
(F7.3,75F6.2)
(' time ',75I6)
SEGTOP
  250 280 6
  350 380 6
  -1 -1 -1
IDEPOT
  6
LEACHI
HEADER      absolute massa (blok 3)
PROPER
  2 3 4
MASSAB
HEADER      massa over rand (blok 4)
BOUNDS
  2 4 5
MASSBN
HEADER      flux over rand (blok 5)
BOUNDS
  2 4 5
FLUXBN
HEADER      relatieve massa (blok 6)
PROPER
  2 3 4
MASSRE
HEADER      maximale concentratie (blok 7)
PROPER
  2 3 4
MAXCON
HEADER      gemiddelde concentratie (blok 8)
LIMIT
  0.0001
PROPER
  2 3 4
MEANCO
HEADER      absoluut volume binnen 4 concentratiegrenzen (blok 9)
RANGES
  4 0.0001 0.001 0.01 0.1
PROPER
  2 3 4
CONVVO
  2.5
VOLABS
HEADER      volume boven grensconcentratie (blok 10)
LIMIT
  0.0001
PROPER
  2 3 4
VOLCON
HEADER      relatief volume binnen 4 concentratiegrenzen (blok 11)
RANGES
  4 0.0001 0.001 0.01 0.1
PROPER
  2 3 4
VOLREL
END

```

In blok 1 worden 4 segmenten aangegeven waarvoor het concentratieverloop in de tijd bepaald moet worden. De concentraties in de *.FLM file worden voorafgaand aan deze bewerking met een factor van 0.15 vermenigvuldigd.

In blok 2 wordt het uitvoerformat vastgelegd op (F7.3,75F6.2). De kopregel heeft het format (' time ',75I6). Vervolgens wordt aan de segmenten 250 t/m 280 en 350 t/m 380 het eigenschapnummer 6 toegekend. Met IDEPOT wordt gesteld dat dit eigenschapnummer het depot voorstelt, en vervolgens wordt de uitloging van de segmenten met dit eigenschapnummer bepaald.

In blok 3 wordt de absolute massa van de segmenten met eigenschapnummer 3 en 4 bepaald (voor beide eigenschapnummers afzonderlijk).

In blok 4 wordt de cumulatieve hoeveelheid massa die het systeem via de randen -4 en -5 heeft verlaten in de tijd bepaald (voor beide randen afzonderlijk).

In blok 5 wordt de flux die het systeem via de randen -4 en -5 heeft verlaten bepaald (voor beide randen afzonderlijk).

In blok 6 wordt de relatieve massa van de segmenten met eigenschapnummer 3 en 4 bepaald (voor beide eigenschapnummers afzonderlijk).

In blok 7 wordt de maximale concentratie in de segmenten met eigenschapnummer 3 en 4 bepaald (voor beide eigenschapnummers afzonderlijk).

In blok 8 wordt de drempelconcentratie op 0.0001 ingesteld. Vervolgens wordt voor de segmenten met eigenschapnummer 3 en 4 de gemiddelde concentratie in de segmenten met een concentratie van meer dan 0.0001 bepaald (voor beide eigenschapnummers afzonderlijk).

In blok 9 worden vier concentratieranges vastgesteld: 0.0001-0.001, 0.001-0.01, 0.01-0.1 en >0.1. Het volume van alle segmenten wordt met een factor 2.5 vermenigvuldigd. Vervolgens wordt voor de deelverzameling van de segmenten met een eigenschapnummer van 3 en 4 het volume bepaald waar de concentratie binnen de gestelde grenzen ligt.

In blok 10 wordt het volume bepaald waar de concentratie hoger is dan 0.001 voor de segmenten met eigenschapnummer 3 en 4 (voor beide eigenschapnummers afzonderlijk).

In blok 11 worden vier concentratieranges ingesteld, en wordt vervolgens het relatieve volume voor de deelverzameling van segmenten met de eigenschapnummers 3 en 4 bepaald.

De *.POP file wordt afgesloten met END.

STYXZ.FLM

functie

De file *.FLM ('film-file') is de hoofdfile voor het programma STYXZP. De file wordt aangemaakt door STYXZ. In de file worden de concentraties in het systeem op het gewenste aantal tijdstippen weggeschreven. Het aantal maal dat informatie wordt weggeschreven wordt bepaald met het commando NPICTU in de invoerfile van STYXZ. Behalve de concentraties wordt ook aanvullende informatie van de berekening weggeschreven, zoals de segmentindeling, de volumina van de segmenten en de hoeveelheid stof die over de modelranden is verdwenen.

opbouw

Deze file is niet-geformatteerd, hetgeen betekent dat de informatie niet zonder hulp van een programma te benaderen is. De informatie in de file kan dus niet op eenvoudige wijze bekeken of aangepast worden, zodat het voor de gebruiker niet erg zinvol is te weten hoe de file is opgebouwd. Eventueel wordt in een volgende versie van de handleiding een beschrijving van een lees- en schrijfroutine voor deze file opgenomen.

voorbeeld

Het is niet zinnig een voorbeeld van deze file te geven, omdat deze niet-geformatteerd is.

STYXZP.PBF

functie

In de file *.PBF wordt de flux die over een rand het systeem is uitgestroomd gegeven, waartoe met het commando FLUXBN opdracht is gegeven.

opbouw

Bovenaan de file wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het commando herhaald en worden de randnummers waarvoor informatie is opgevraagd gegeven. De waarden worden op de volgende regels in het format (F7.0,75E11.4) of (F7.1,75E11.4) afgedrukt. De keuze tussen beide formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75E11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75E11.4). Het format van de file kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```
.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|
titel van de film-file
FLUXBN      for bounds
time        1
  0. 0.0000E+00
 25. 0.0000E+00
 50. 0.1000E+01
 75. 0.2000E+01
100. 0.6000E+01
125. 0.1400E+02
150. 0.2500E+02
175. 0.3500E+02
200. 0.4000E+02
```

De flux over rand nummer -1 is op T=0. en T=25. nog nul,, op T=50. is er de flux 1.0 eenheid massa per jaar, op T=75. 2.0 eenheden/jaar enz.

STYXZP.PBM

functie

In de file *.PBM wordt de cumulatieve massa die over een rand het systeem is uitgestroomd gegeven, waartoe met het commando MASSBN opdracht is gegeven.

opbouw

Bovenaan de file wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het commando herhaald en worden de randnummers waarvoor informatie is opgevraagd gegeven. De waarden worden op de volgende regels in het format (F7.0,75E11.4) of (F7.1,75E11.4) afgedrukt. De keuze tussen beide formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75E11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75E11.4). Het format van de file kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
titel van de film-file
MASSBN      for bounds
time        1
   0. 0.0000E+00
  25. 0.0000E+00
  50. 0.1000E+01
  75. 0.2000E+01
 100. 0.6000E+01
 125. 0.1400E+02
 150. 0.2500E+02
 175. 0.3500E+02
 200. 0.4000E+02

```

Over rand nummer -1 is op T=0. en T=25. nog geen massa uitgestroomd, op T=50. is er 1.0 eenheid uitgestroomd, op T=75. 2.0 eenheid enz.

STYXZP.PLB

functie

In de file *.PLB worden de absolute of relatieve massa's voor de geselecteerde eigenschapsnummers weggeschreven. De file wordt aangemaakt na het commando MASSAB of MASSRE en bevat dat respectievelijk de absolute en de relatieve massa's.

opbouw

In de kopregel wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het commando herhaald, en worden de eigenschapsnummers gegeven waarvoor de analyse is uitgevoerd. Indien er massa's weergegeven worden is het format van de volgende regels (F7.0,75E11.4) of (F7.1,75E11.4). Indien er relatieve massa's weergegeven worden is het format (F7.0,75F11.4) of (F7.1,75F11.4). De keuzen van de formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75E/F11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75E/F11.4). Het format van de file kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
titel van de film-file
MASSAB      for properties:
time        1          2          3          4          5          6
  0. 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
 25. 0.4248E+03 0.1019E+04 0.5423E+04 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
 50. 0.8496E+03 0.2043E+04 0.1093E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
 75. 0.1274E+04 0.3054E+04 0.1634E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
100. 0.1841E+04 0.4086E+04 0.2184E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
125. 0.2124E+04 0.5101E+04 0.2727E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
150. 0.2690E+04 0.6137E+04 0.3269E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
175. 0.3115E+04 0.7160E+04 0.3827E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08
200. 0.3469E+04 0.8167E+04 0.4370E+05 0.0000E+00 0.0000E+00 0.7653E+08

```

Deze file is weggeschreven na de opdracht MASSAB. Er is voor 6 eigenschapnummers (1-6) informatie opgevraagd. Op T=0 bevatten de segmenten met eigenschapnummer 1-5 geen massa en bevatten de segmenten met eigenschapnummer 6 0.7653E+08 eenheden massa. Op t+200. bevatten de segmenten met eigenschapnummers 1, 2, 3, 4, 5 en 6 respectievelijk 0.3469E+04, 0.8167E+04, 0.4370E+05, 0.0, 0.0 en 0.7653E+08 eenheden massa.

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
titel van de film-file
MASSRE      for properties:
time        1          2          3          4          5          6
  0. 0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.9800
 25. 0.0000    0.0000    0.0002    0.0000    0.0000    0.9800
 50. 0.0000    0.0001    0.0004    0.0000    0.0000    0.9800
 75. 0.0000    0.0001    0.0006    0.0000    0.0000    0.9800
100. 0.0001    0.0002    0.0008    0.0000    0.0000    0.9800
125. 0.0001    0.0002    0.0010    0.0000    0.0000    0.9800
150. 0.0001    0.0002    0.0012    0.0000    0.0000    0.9700
175. 0.0001    0.0003    0.0014    0.0000    0.0000    0.9700
200. 0.0001    0.0003    0.0016    0.0000    0.0000    0.9700

```

Deze file is weggeschreven na het commando MASSRE en bevat de relatieve massa's voor zes eigenschapnummers (1-6). Op T=175. is in de segmenten met eigenschapnummer 1, 2, 3, 4, 5 of 6 respectievelijk 0.01%, 0.02%, 0.12%, 0.00%, 0.00% en 97.00% van de totale massa in het systeem aanwezig.

STYXZP.PLC

functie

In de file *.plc worden de concentraties van de gewenste segmenten weggeschreven. Deze concentraties zijn met behulp van de waarde van CONMAX geschaald (zie STYXZ). De file wordt aangemaakt nadat het commando CONCEN is gegeven.

opbouw

In de kopregel wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het commando herhaald, en wordt aangegeven voor welke segmenten de gegeven concentraties gelden. Het default format voor de resterende regels is (F7.0,75F11.4) of (F7.1,75F11.4). De keuze tussen beide formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75F11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75F11.4). Het format van de file kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```
.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|.....*.....|
Titel van de film-file
CONCEN          for segments:
time           142
  0.           1.0000
 25.           0.9950
 50.           0.9910
 75.           0.9850
100.           0.9780
125.           0.9710
150.           0.9660
175.           0.9590
200.           0.9500
```

In deze file is alleen het concentratieverloop van segment nummer 142 weergegeven. Op $t=125$. is de concentratie in dit segment gelijk aan 0.9710 eenheden per m^3 .

STYXZP.PLG

functie

Deze file heeft in principe dezelfde opbouw als de *.LGT file (zie STYXZ). In de file is voor elk tijdstip de massa in het depot, de massa in het depot als percentage van de totale massa, de flux uit het depot, de massa in het systeem, de massa in het systeem als percentage van de totale massa en de flux uit het systeem gegeven. De file wordt weggeschreven na het commando LEACHI.

opbouw

In de kopregel wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het invoercommando herhaald, en wordt het eigenschapnummer gegeven dat als depot is beschouwd. Het default format is (F7.0,75E11.4) of (F7.1,75E11.4) voor de dataregels. De keuze tussen beide formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75E11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75E11.4). Het format van de file kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
titel van de film-file
LEACHI      for depot prop:      1
  time  mass dep  perc dep  flux dep  mass sys  perc sys  flux sys
   0.  0.1500E+03  0.0000E+00  0.0000E+00  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
  25.  0.1400E+03  0.9333E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
  50.  0.1300E+03  0.8666E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
  75.  0.1200E+03  0.8000E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
 100.  0.1100E+03  0.7333E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
 125.  0.1000E+03  0.6666E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
 150.  0.9000E+02  0.6000E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
 175.  0.8000E+02  0.5333E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00
 200.  0.7000E+02  0.4666E+02-0.1000E+02  0.1500E+03  0.1000E+03  0.0000E+00

```

Deze file geeft de massa in de segmenten met het eigenschapsnummer 1. Deze segmenten zijn tot depot benoemd. Op $t=50$. bevat het depot 130. eenheden stof, hetgeen 86.66% is van de initiële hoeveelheid. De flux is dan -10. eenheden per jaar. De massa in het systeem is constant: 150. eenheden. Er is na 200. tijdseenheden nog geen stof uit het systeem verdwenen.

STYXZP.PLL

functie

In de file *.PLL wordt het volume van het een gekozen deelverzameling van eigenschapsnummers gegeven waar de concentratie hoger is dan de opgegeven drempelwaarde. Bovendien wordt het horizontale oppervlak, de gemiddelde en de maximale concentratie van deze deelverzameling gegeven. Het commando VOLCON geeft opdracht tot het aanmaken van deze file.

opbouw

In de kopregel wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het commando herhaald, en wordt de limietwaarde die is gebruikt gegeven. daarachter volgen de eigenschapsnummers van de beschouwde verzameling van segmenten. Het default format voor de dataregels is (F7.0,75E11.4) of (F7.1,75E11.4). De keuze tussen beide formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75E11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75E11.4). Het format van de file kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
titel van de film-file
VOLCON   for limit: 0.00100 properties:  1  2  3  4  5  6
time     volume area      concmean concmax
  0. 0.2024E+05 0.2024E+05 0.1470E+02 0.1470E+02
 25. 0.2150E+05 0.2150E+05 0.1384E+02 0.1470E+02
 50. 0.2167E+05 0.2167E+05 0.1373E+02 0.1470E+02
 75. 0.2171E+05 0.2171E+05 0.1371E+02 0.1470E+02
100. 0.2175E+05 0.2175E+05 0.1368E+02 0.1470E+02
125. 0.2175E+05 0.2175E+05 0.1368E+02 0.1470E+02
150. 0.2175E+05 0.2175E+05 0.1368E+02 0.1470E+02
175. 0.2175E+05 0.2175E+05 0.1369E+02 0.1470E+02
200. 0.2175E+05 0.2175E+05 0.1369E+02 0.1470E+02

```

De geanalyseerde deelverzameling bestaat uit de segmenten met een eigenschapnummer 1, 2, 3, 4, 5 en 6. De drempelconcentratie is 0.001. Op $t=50$. is bij deze deelverzameling een volume van $0.2167E+05 \text{ m}^3$ tot boven de drempelwaarde verontreinigd. Dit is een oppervlak van $0.2167E+05 \text{ m}^2$ (mits de dikte van de segmenten gelijk is aan 1 meter!). De gemiddelde concentratie in de deelverzameling is op $t=50$. 13.73 eenheden, en de maximale concentratie is 14.7 eenheden.

STYXZP.PLM

functie

In de file *.PLM worden de gemiddelde concentraties voor elk van de gekozen eigenschapnummers weggeschreven, voor die segmenten waar de concentratie hoger is dan de waarde die als drempelwaarde is opgegeven. De file wordt weggeschreven na het commando MEANCO.

opbouw

In de kopregel wordt de titel van de film-file gegeven. Vervolgens wordt het commando herhaald, wordt de gebruikte limietwaarde gegeven en worden de eigenschapnummers gegeven waarvoor de gemiddelde concentraties gelden. Het default format voor de dataregels is (F7.0,75F11.4) of (F7.1,75F11.4). De keuze tussen beide formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dan 10.0 wordt het format (F7.1,75F11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75F11.4). Het format van de dataregels kan ook met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

STYXZP.PLX

functie

In de *.PLX file worden de maximale concentraties weggeschreven voor alle geselecteerde eigenschapnummers. de file wordt weggeschreven na het commando MAXCON.

opbouw

In de kopregel wordt de titel van de film-file herhaald. Vervolgens wordt het commando gegeven, en worden de eigenschapnummers waarvoor de file geldt gegeven. Het default format voor de resterende regels is (F7.0,75F11.4) of (F7.1,75F11.4). De keuze tussen de formats is afhankelijk van de uitvoertijdstep; indien deze kleiner is dat 10.0 wordt het format (F7.1,75F11.4) gekozen en anders het format (F7.0,75F11.4). Het format van de file kan met het commando FORMAT in een *.POP file opgegeven worden.

voorbeeld

```

.....|.....|.....|.....|.....|.....|.....|
MAXCON  for properties:
time    1      2      3      4      5      6
  0.    0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  14.6999
 25.    0.0005  0.0071  0.0081  0.0000  0.0000  14.6999
 50.    0.0007  0.0142  0.0162  0.0000  0.0000  14.6999
 75.    0.0012  0.0211  0.0243  0.0000  0.0000  14.6999
100.    0.0017  0.0282  0.0321  0.0000  0.0000  14.6999
125.    0.0020  0.0353  0.0402  0.0000  0.0000  14.6999
150.    0.0025  0.0424  0.0483  0.0000  0.0000  14.6999
175.    0.0029  0.0495  0.0564  0.0000  0.0000  14.6999
200.    0.0034  0.0564  0.0644  0.0000  0.0000  14.6999

```

De drempelwaarde die in de topregel wordt gegeven is niet relevant. Vervolgens wordt voor de segmenten met eigenschapnummer 1, 2, 3, 4, 5 of 6 op elk tijdstip de maximale concentratie gegeven. Op t=200. bedraagt deze respectievelijk 0.0034, 0.0564, 0.0644, 0.0000, 0.0000 en 14.6999.

3.5.3 Foutmeldingen

Nog te implementeren.

4 Literatuur

- Boris, J.P., and D.L. Book, 1973
Flux-corrected transport I: SHASTA a fluid algorithm that works
J. Comp. Phys., 11, 38-69
- Rooij, N.M. de, 1993
Beperking diffusie baggerspeciedepots
Waterloopkundig Laboratorium, Delft

Bijlage A Termen

Segment	:	een gridcel
Kolom	:	een groep segmenten met dezelfde X-coördinaat (X van links naar rechts)
Rij	:	een groep segmenten met dezelfde Y-coördinaat (Y van noord naar zuid)
Laag	:	een groep segmenten met dezelfde Z-coördinaat (Z van boven naar beneden)
Systeem	:	het gemodelleerde gebied, bestaat uit $NX * NY * NZ$ segmenten (ofwel aantal kolommen * aantal rijen * aantal lagen)
Randcel	:	segment dat een uitwisseling heeft met een modelrand
Rand	:	ruimtelijke begrenzing van het model, de rand ligt buiten het model
Randuitwisseling	:	massastroming tussen het model en de modelrand
Van-cel	:	segment waaruit een flux afkomstig is
Naar-cel	:	segment waar een flux naar toe gaat
Verblijftijd	:	tijd dat een stof in een segment verblijft; is gelijk aan de massa in het segment gedeeld door de helft van de som van de absolute waarden van de massafluxen tussen dit segment en de rest van het systeem
Eigenschapnummer	:	Codenummer voor een segment, waarmee eigenschappen toegekend kunnen worden, en waarmee groepen van segmenten gecreeerd worden
Celnummer	:	Uniek nummer van elk segment, ook wel segmentnummer genoemd. Het nummer is te bepalen uit $(\text{laagnummer}-1)*\text{nkolom}*\text{nrij} + (\text{rijnummer}-1)*\text{nkolom} + \text{nkolom}$, waarin nkolom en nrij het totale aantal kolommen of rijen is.

Bijlage B Installatie

De installatie van STYXZ is betrekkelijk eenvoudig. De programma's STYXZ, STYXZF, STYXZG en STYXZP kunnen op de werkdirectory voorkomen, maar het is handiger deze programma's op een standaard directory te plaatsen, en hier met behulp van batch-files naar te verwijzen. Op de schijf waarvan de programma's gedraaid worden moet de directory STYXZ aanwezig zijn, waarin zich de files PLOT.DEV en STYXZ.HLP moeten bevinden. In deze file kunne ook de programma's geplaatst worden. De files waar de file PLOT.DEV naar verwijst moeten op de betreffende plek te vinden zijn.

Als van de E:\schijf (indien een andere schijf wordt gebruikt moet in plaats van E:, D: of C: ingevuld worden) gerekend wordt is de handigste plaatsing van programma's en de hulpfiles als volgt:

```
E:\styxz\PLOT.DEV
E:\styxz\styxz.HLP
E:\styxz\styxz.EXE
E:\styxz\styxzf.EXE
E:\styxz\styxzg.EXE
E:\styxz\styxzf.EXE
E:\styxz\ahdlfpl.krn
E:\styxz\ahdibmv.dsp
E:\styxz\ahdljtp.prt
E:\styxz\ahdbw8.prt
```

De file PLOT.DEV moet er in dit geval als volgt uitzien:

```
E:\styxz\ahdlfpl.krn
E:\styxz\ahdibmv.dsp
2
E:\styxz\ahdljtp.prt
1 9 11 27 23 52 4 38 18 54 7 36 13 51 29 63
1280 960 1 0 0 0 0 2 0 0 0 0 -1 -1 -1 -1 2 -1 -1 0 -1 -1 32 -1 -1
line 1 is place of kernel lib
line 2 is screen device
line 3 is mode
line 4 is print device
line 5 are 16 colours
line 6 are patterns for printer
Next two lines for HP laserjet printer
E:\styxz\ahdljtp.prt
1280 960 1 0 0 0 0 2 0 0 0 0 -1 -1 -1 -1 2 -1 -1 0 -1 -1 32 -1 -1
Next two lines for matrix printer (epson compatible)
E:\styxz\ahdbw8.prt
-1 -1 0 0 0 0 0 1 -1 0 0 0 0 -1 -1 -1 0 -1 -1 0 -1 -1 1 1 1
```

Berekeningen kunnen dan uitgevoerd worden op een directory die bijvoorbeeld E:\CASE1\RUN1 heet. Op deze directory moeten vervolgens alle benodigde invoerfiles geplaatst worden. De programma's kunnen vanuit deze directory opgeroepen met behulp van batch-files. Een voorbeeld hiervan is de file STYXZF.BAT waarmee STYXZF opgeroepen wordt. In deze file is de volgende regel aanwezig:

```
E:\STYXZ\STYXZF %1
```

Het aanroepcommando voor STYXZF ziet er dan als volgt uit: STYXZF.BAT FILENAAM.FLM, waarbij FILENAAM.FLM de film-file is die getoond moet worden.

Voor de printeropties zijn vele mogelijkheden beschikbaar. De hier getoonde optie werkt op WL goed, bij gebruik van een HP laserjet III. Indien andere printers, of printeropties gebruikt worden moeten de namen AHDLJTP.PRT en AHDBW8.PRT aangepast worden, en moeten de bijhorende files op de STYXZ-directory geplaatst worden. Ook de printerinstellingen in PLOT.DEV kunnen veranderd worden.