

ENIGE OPMERKINGEN MET BETREKKING TOT HET OPLOSSEN
VAN DE ZOUTDIFFUSIEVERGELIJKING MET BEHULP
VAN DIFFERENTIEMETHODES

NOTA 56

J.V. Witter

LABORATORIUM VOOR HYDRAULICA EN
AFVOERHYDROLOGIE
LANDBOUWHOGESCHOOL
Mei 1982.

INHOUD

bladzijde

WOORD VOORAF	1
1. INLEIDING	2
2. DE ZOUTDIFFUSIEVERGELIJKING	3
3. HET OPLOSSEN VAN DE ZOUTDIFFUSIEVERGELIJKING MET BEHULP VAN EINDIGE DIFFERENTIES	6
3.1. Differentieschema's	6
3.2. Massabehoud	7
3.3. Randvoorwaarden en beginvoorwaarden	7
3.4. Koppeling van de zoutdiffusieberekening aan de berekening van de waterbeweging	9
4. CRITERIA VOOR STAPGROOTTEN	11
4.1. Analyse van de afbreekfout	11
4.2. Analyse van de golfvoortplanting	11
4.3. Keuze van de maatgevende golflengte	16
5. EEN VOORBEELD VAN EEN EXPLICIET REKENSHEMA	19
6. EEN WISKUNDIG MODEL OF NIET	20
7. LITERATUUR	23
APPENDIX: FROMM.FOR, subroutine ter berekening van advection (volgens schema van Fromm, 2 ^e en 4 ^e orde benadering) en dispersief transport van zout.	

WOORD VOORAF

De inhoud van deze nota komt overeen met de inhoud van een in het najaar van 1981 gehouden stafcolloquium. Enige leden van de vakgroep, alsmede dr.ir. R.W.R. Koopmans (vakgroep Cultuurtechniek) becommentarieerden de concept-tekst van deze nota, waarvoor mijn hartelijke dank.

De nota stipt enkele problemen aan betreffende het oplossen van de zout-diffusievergelijking met behulp van differentiemethodes. Bijna alle resultaten zijn standaardresultaten van de numerieke vloeistofmechanica en zijn afkomstig uit ROACHE (1976) en VREUGDENHIL (1979). De geïnteresseerde lezer wordt met klem naar deze handboeken verwezen.

1. INLEIDING

Numerieke methodes voor het berekenen van de waterbeweging in open waterlopen zijn welbekend; voor een aantal toepassingen zie b.v. GRIJSEN (1971), WARMERDAM (1971) en WITTER (1979). Nu, mede door de toegenomen aandacht voor waterkwaliteitsproblemen, numerieke oplossingen van de zoutdiffusievergelijking gezocht worden, is beschouwing van enkele daarbij optredende problemen gerechtvaardigd.

De zoutdiffusievergelijking is op te lossen met behulp van differentiemethodes, de eindige elementen methode en analytische methodes. De karakteristiekenmethode, waarbij het gedrag van de differentiaalvergelijkingen wordt beschouwd langs karakteristieken, is niet bruikbaar voor het oplossen van de zoutdiffusievergelijking (VREUGDENHIL, 1979; p. 15). In deze nota wordt slechts ingegaan op enige problemen met betrekking tot het oplossen van de zoutdiffusievergelijking met behulp van differentiemethodes. Allereerst wordt in hoofdstuk 2 een afleiding gegeven van de zoutdiffusievergelijking. In hoofdstuk 3 worden enige algemene zaken betreffende oplossingen met behulp van differentiemethodes aan de orde gesteld:

- orde van grootte van de afstandsstappen
- impliciet of expliciet rekenen
- keuze van het differentieschema
- behandeling van begin- en randvoorwaarden
- koppeling van de zouttransportberekening aan de berekening van de waterbeweging
- problemen met betrekking tot het behoud van massa

In hoofdstuk 4 zullen aan de hand van een beschouwing van de afbreekfout van het differentieschema, van de stabiliteit van de berekening en van de nauwkeurigheid van de oplossing criteria voor de stapgrootten Δx en Δt afgeleid worden. In hoofdstuk 5 wordt een voorbeeld gegeven van een expliciet differentieschema voor het oplossen van de zoutdiffusievergelijking, het schema van Fromm (2^e en 4^e orde versie). Tenslotte worden in hoofdstuk 6 twee niet-numerieke methodes besproken, waarmee eveneens praktische vragen met betrekking tot zoutindringing in rivieren beantwoord kunnen worden. Deze worden besproken, aangezien in lang niet alle situaties de investeringen in geld en mankracht, die nodig zijn voor het numeriek oplossen van zoutindringingsproblemen, gerechtvaardigd zijn.

2. DE ZOUTDIFFUSIEVERGELIJKING

Hier wordt uitgegaan van de een-dimensionale, over de diepte gemiddelde ("depth-averaged") vorm van de zoutdiffusievergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial t} (A_t c) + \frac{\partial}{\partial x} (Qc) = \frac{\partial}{\partial x} (A_s D \frac{\partial c}{\partial x}) \quad (1)$$

waarin:

A_t = oppervlakte van het natte profiel (m^2)

A_s = oppervlakte van het doorstroomd profiel (m^2)

Q = debiet (m^3/s)

D = dispersie- of diffusiecoëfficiënt (m^2/s)

c = zoutconcentratie (kg/m^3)

t = tijdscoördinaat (s)

x = plaatscoördinaat, beschouwd in de richting van de stroomdraad (m)

Vergelijking (1) geeft de zoutdiffusievergelijking weer in de behoudende vorm (van massa). Naast deze behoudende formulering in Q en c bestaat een formulering in de stroomsnelheid u en in c , waarbij doordat er een aantal termen verwaarloosd worden, massabehoud niet gegarandeerd is:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2)$$

waarin:

u = gemiddelde stroomsnelheid over het doorstroomd profiel (m/s)

De zoutdiffusievergelijking is een combinatie van een vergelijking die het transport van het zout beschrijft en van een continuïteitsvergelijking voor het zout (ALLERSMA, 1973). Het advectief transport θ_1 van een opgeloste stof met concentratie c door een dwarsdoorsnede met een oppervlakte van $1 m^2$ is:

$$\theta_1 = uc \quad (3)$$

waarin: θ_1 = advectief transport ($kg \cdot s^{-1} \cdot m^{-2}$)

Het dispersief transport θ_2 van zout als gevolg van allerlei mengprocessen is te beschouwen als de uitwisseling van eenheidsvolumes water met concentraties opgeloste stoffen c_1 en c_2 (hier $c_1 < c_2$) over een afstand ("mixing length") l en met snelheid u' . Dit transport is te schrijven als:

$$\theta_2 = -u' \frac{l(c_2 - c_1)}{l} = -u' l \frac{\partial c}{\partial x} \quad (4)$$

waarin:

$$\theta_2 = \text{transport als gevolg van mengprocessen (kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2})$$

en waarbij het minteken in (4) tot uitdrukking brengt dat het transport plaats vindt in de richting van de laagste concentratie. Merk op dat ℓ beschouwd kan worden als een fysische lengtemaat voor compartimentering. Vergelijking (4) is ook te schrijven als:

$$\theta_2 = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (5)$$

Voor het totale transport θ geldt vanwege $\theta = \theta_1 + \theta_2$:

$$\theta = uc - D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (6)$$

In de continuïteitsvergelijking voor de opgeloste stoffen verschijnt bij beschouwing van een eenheidsvolume:

- de gradiënt in de stromingsrichting x van het transport: $\frac{\partial \theta}{\partial x}$
- de verandering van de concentratie in de tijd: $\frac{\partial c}{\partial t}$
- en, wanneer een niet-passieve stof wordt beschouwd, de afbraak van de te transporteren stof. Deze wordt hier verondersteld proportioneel te zijn met de concentratie: $\frac{c}{\gamma}$ (nb.: voor zouttransport geldt voor de afbraakconstante γ : $\gamma = \infty$).

Vanwege de continuïteit van massa moet bij beschouwing van een eenheidsvolume gelden:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial \theta}{\partial x} - \gamma \quad (7)$$

Voor het zouttransport geldt: $\frac{c}{\gamma} = 0$. Dus wordt vergelijking (7):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

Geïntegreerd over de dwarsdoorsnede van een rivier luidt de continuïteitsvergelijking:

$$\frac{\partial (A_t c)}{\partial t} + \frac{\partial \theta_t}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

waarin θ_t het totale transport is, geïntegreerd over de oppervlakte van het doorstroomd profiel:

$$\theta_t = A_s uc - A_s D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (10)$$

Substitutie van (10) in (9) leidt tot de zoutdiffusievergelijking volgens (1). Opgemerkt kan worden dat (1) een identiteit is, en daarmee per definitie exact. De prijs die voor deze exactheid betaald moet worden, is dat de parameter D allerlei verschillende optredende mengprocessen moet representeren:

- (1) moleculaire diffusie
- (2) turbulente diffusie
- (3) dispersie als gevolg van ongelijke verdeling van de stroom over de dwarsdoorsnede
- (4) dispersie veroorzaakt door golven en wind
- (5) dispersie veroorzaakt door tijdelijke berging in riviergedeelten langs de stroomdraad
- (6) dispersie veroorzaakt door menging van oscillerende getijstromen.

De moleculaire bijdrage is gewoonlijk verwaarloosbaar. De turbulente bijdrage en de dispersiebijdragen zijn in principe niet uit een een-dimensionale beschouwing af te leiden. Voor de berekening van de dispersiecoëfficiënt D zij hier verwezen naar THATCHER en HARLEMAN (1972a), waar een relatie gegeven wordt tussen D en een aantal estuariumparameters. Deze relatie moet overigens voor iedere door te rekenen situatie gecalibreerd worden.

3. HET OPLOSSEN VAN DE ZOUTDIFFUSIEVERGELIJKING MET BEHULP VAN EINDIGE DIFFERENTIËN.

3.1. Differentieschema's

Als de zoutdiffusievergelijking wordt opgelost met een differentiemethode, wordt de differentiaalvergelijking (1) geschreven als differentievergelijking:

$$\frac{\Delta(A_t c)}{\Delta t} + \frac{\Delta(Qc)}{\Delta x} = \frac{\Delta(A_s D \frac{\Delta c}{\Delta x})}{\Delta x} \quad (11)$$

Als orde van grootte voor de afstandstappen Δx en Δt kan voor het geval van estuariumberekeningen gedacht worden aan 5000 m, resp. 2000 seconden, alhoewel de uiteindelijk in een berekening te kiezen grootte van beide afstandstappen sterk afhankelijk is van het gebruikte differentieschema en van het door te rekenen probleem. In hoofdstuk 4 wordt hierop teruggekomen. De differenties in vergelijking (11) worden geëvalueerd volgens bepaalde differentieschema's. Differentiemoleculen behorende bij enige veel toegepaste differentieschema's zijn weergegeven in figuur 1. ROACHE (1976) geeft een zeer volledig overzicht van mogelijke differentieschema's, alsmede achtergronden ervan.

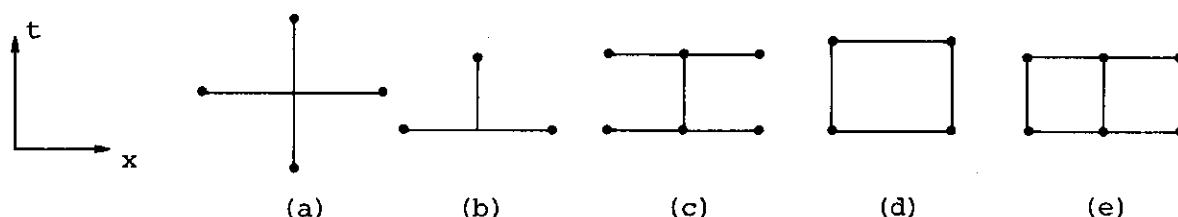


fig. 1: differentiemoleculen behorend bij de volgende differentieschema's:

- | | |
|---------------------|-----------------|
| (a) leap-frog | (d) vierpunts |
| (b) voorwaarts | (e) Stone-Brian |
| (c) Crank-Nicholson | |

Met betrekking tot figuur 1 kan nog opgemerkt worden dat schema's (a) en (b) expliciete schema's zijn, en (c), (d) en (e) impliciete. Bij expliciete schema's worden de afgeleiden in de x-richting op het oude tijdsniveau geëvalueerd, terwijl deze bij impliciete schema's zowel op het oude als het nieuwe tijdsniveau geëvalueerd worden, waarna gemiddeld wordt. Hierdoor zijn bij een impliciet schema grotere tijdstappen mogelijk. In hoofdstuk 4 wordt hierop teruggekomen.

Een bezwaar tegen impliciet rekenen is dat het resulteert in een stelsel vergelijkingen dat simultaan opgelost moet worden om de zoutgehalten op het nieuwe tijdsniveau in de roosterpunten te berekenen. In het geval van een on-

vertakt estuarium kan elk van de vergelijkingen van het stelsel geschreven worden in de vorm:

$$Ac_{j-1}^{t+1} + Bc_j^{t+1} + Cc_{j+1}^{t+1} = D$$

waarin:

$$c_j^{t+1} = \text{zoutgehalte in roosterpunt } j \text{ op het nieuwe tijdsniveau } t+1 \\ (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$$

In matrixnotatie:

$$\begin{bmatrix} \diagdown & & & \\ & \diagdown & & \\ & & \diagdown & \\ & & & \diagdown \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} c_1^{t+1} \\ c_2^{t+1} \\ \vdots \\ c_j^{t+1} \\ \vdots \\ c_n^{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_j \\ \vdots \\ D_n \end{bmatrix} \quad (12)$$

Dit stelsel is snel oplosbaar, zonder dat dit veel geheugenruimte van de computer vereist. Subroutines voor het oplossen van dergelijke tridiagonale stelsels vergelijkingen behoren tot de standaardprogrammatuur, aanwezig op rekencentra (b.v. opgenomen in het IMSL-pakket). In HARLEMAN en THATCHER (1972b) is een listing opgenomen van een subroutine voor het oplossen van tridiagonale stelsels vergelijkingen (subroutine TRIDG).

In het geval van een vertakt estuarium is de matrix in (12) niet meer tridiagonaal, maar ontstaat er een "sparse" matrix doordat in de matrix de nullen buiten de 3 hoofddiagonalen op sommige posities worden vervangen door getallen ongelijk aan nul. Ook hiervoor bestaan efficiënte subroutines (niet aanwezig in de IMSL-bibliotheek). Deze vereisen echter al meer geheugencapaciteit van de computer. Indien het kerngeheugen van de computer te klein is, is gebruik van expliciete berekeningsmethoden te overwegen.

3.2. Massabehoud

Voor het verkrijgen van massabehoud in de berekeningen moet allereerst de zoutdiffusievergelijking in zijn behoudende vorm worden beschouwd, dat wil zeggen: vergelijking (1) in plaats van (2). Dit garandeert echter nog geen massabehoud in de berekeningen, aangezien dit afhankelijk is van de manier waarop de afgeleides geëvalueerd worden.

3.3. Randvoorwaarden en beginvoorwaarden

Stel dat beschouwd wordt het in figuur 2 schematisch weergegeven estua-

rium.

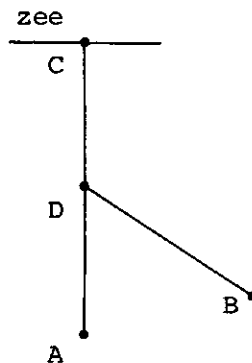


fig. 2: schematische voorstelling van een door te rekenen estuarium.

In de benedenstroomse rand C zal bij het opkomend tij het nieuwe zoutgehalte gelijk zijn aan c_0 , het zoutgehalte in zee. Bij afgaand tij wordt een "zwakke voorwaarde" gehanteerd, waarbij de tweede afgeleide in het rechterlid van (1) gelijk aan nul wordt gesteld (VREUGDENHIL, 1979; p. 86). De differentievergelijking wordt dan bij afgaand tij in het punt C:

$$\frac{\Delta(A_{\pm C})}{\Delta t} + \frac{\Delta(Q_C)}{\Delta x} = 0 \quad (13)$$

Bij kentering van afgaand naar opkomend tij zal in het algemeen het zoutgehalte aan de monding niet direct gelijk zijn aan c_0 . Daartoe kan in een berekeningsprogramma gedurende een aantal tijdstappen een lineaire interpolatie plaatsvinden tussen het laatst berekende zoutgehalte gedurende het afgaande tij en c_0 . Deze procedure is voorgesteld door HARLEMAN en THATCHER (1972a).

Aan de bovenstroomse randen A en B moet het nieuwe zoutgehalte opgegeven worden; dit is veelal gelijk aan nul. Ook kan in plaats van het nieuwe zoutgehalte de instroming, beschreven door (10), op het nieuwe tijdstip opgegeven worden.

Interne randen of knooppunten treden op bij het samenkomen van estuariumtakken. Ze worden doorgerekend met een soort van massabalans. Merk op dat in het knooppunt D in feite 3 berekeningspunten samenvallen, en voor het punt D wordt nu gesteld:

$$\frac{\Delta(Vc)_D + \Sigma \text{flux}}{\Delta t} = 0 \quad (14)$$

waarin:

V = volume van de watermassa in het knooppunt (m^3)

Bij uitwerking van (14) met een Stone-Brian of een Crank-Nicholson schema levert dit voor elk knooppunt één vergelijking op, met één onbekende meer

dan het knooppunt takken heeft (vandaar het optreden van "sparse" matrices, dat al in hoofdstuk 3.1. vermeld werd).

3.4. Koppeling van de zoutdiffusieberekening aan de berekening van de waterbeweging

Bij de berekening van zowel de waterbeweging als de zoutindringing worden de voor elke nieuwe tijdstap in de berekening gevonden waarden van het debiet en de oppervlakte in de roosterpunten j , resp. Q_j^{t+1} en A_j^{t+1} , gebruikt in de zoutdiffusievergelijking om de nieuwe zoutgehalten c_j^{t+1} te vinden. Naast deze koppeling van de zoutberekening aan de berekening van de waterbeweging is ook een terugkoppeling gewenst, omdat de soortelijke massa van het water als gevolg van het zouttransport niet langer constant verondersteld mag worden. Hierdoor wordt de impulsvergelijking voor de waterbeweging uitgebreid met een term waarin de soortelijke massa ρ van het water:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A_s} \right) + gA_s \frac{\partial a}{\partial x} + gA_s \frac{\partial z_o}{\partial x} + g \frac{Ad_c}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + g \frac{Q|Q|}{A_s K_m^2 R^{4/3}} = 0 \quad (15)$$

waarin:

- g = versnelling van de zwaartekracht (m/s^2)
- a = waterdiepte (m)
- z_o = bodemhoogte t.o.v. een referentievlak (m)
- d_c = afstand van het zwaartepunt van het doorstroomd oppervlak tot de bodem (m)
- ρ = soortelijke massa van het water (kg/m^3)
- K_m = Manning-coëfficiënt ($m^{1/3}/s$)
- R = hydraulische straal (m)

Voordat nu in de berekening van de waterbeweging een nieuwe tijdstap wordt doorgerekend, wordt in alle roosterpunten de nieuwe soortelijke massa ρ bepaald met behulp van de daarvoor gevonden nieuwe zoutgehalten, volgens de toestandsvergelijking:

$$\rho_j^{t+1} = 0.75 c_j^{t+1} + 1000 \quad (16)$$

Volledigheidshalve wordt nog de continuïteitsvergelijking voor het water vermeld:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + B \frac{\partial a}{\partial t} = q_\ell \quad (17)$$

waarin:

- B = totale breedte van de rivier (m)
- q_ℓ = zijdelingse toe- of afvoer per meter rivierlengte (m^2/s)

Onderstaande figuur 3 geeft nu het schema van de berekeningen.

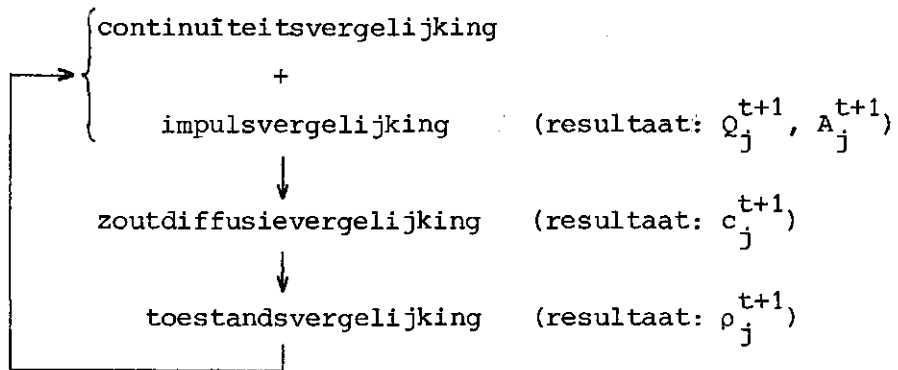


fig. 3: Schema voor een gekoppelde berekening van de waterbeweging en zoutindringing.

4. CRITERIA VOOR STAPGROOTTEN

4.1. Analyse van de afbreekfout

Een eerste criterium wordt ontleend aan de afbreekfout van de differentievergelijking ten opzichte van de differentiaalvergelijking. Indien alleen de advectionstermen in de zoutdiffusievergelijking volgens (2) worden beschouwd:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (18)$$

levert bij een voorwaarts differentieschema een Taylorontwikkeling op:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c_j^{t+1} - c_j^t}{\Delta t} - \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \dots \quad (19)$$

en

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c_{j+1}^t - c_{j-1}^t}{2\Delta x} - \frac{1}{6} (\Delta x)^2 \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \dots \quad (20)$$

Er wordt dus een afbreekfout A gemaakt:

$$A = \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + \dots \quad (21)$$

en (21) is, met verwaarlozing van hogere orde termen en indien uitgegaan wordt van een stromingssnelheid u die niet verandert met de tijd, te schrijven als:

$$A = \frac{1}{2} u^2 \Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (22)$$

De term $\frac{1}{2} u^2 \Delta t$ in (22) kan opgevat worden als een numerieke diffusiecoëfficiënt D_n :

$$D_n = \frac{1}{2} u^2 \Delta t \quad (23)$$

Wil deze numerieke diffusie niet te groot zijn, dan zal in een berekening dus moeten gelden:

$$\frac{D_n}{D} = \frac{u^2 \Delta t}{2D} \ll 1 \quad (24)$$

4.2. Analyse van de golfvoortplanting

Andere criteria met betrekking tot stapgrootten volgen uit de eisen die gesteld worden ten aanzien van stabiliteit en nauwkeurigheid van de berekeningen. Van stabiliteit wordt gesproken als fouten in de berekeningen (bijv. als gevolg van benaderingen) niet explosief aangroeien. De grootte van de bereikte nauwkeurigheid wordt aangeduid door de discretiseringsfout: de fout in de oplossing van de differentievergelijking vergeleken met de oplossing van de differentiaalvergelijking. Uitspraken over stabiliteit en nauwkeurigheid kunnen het best onderzocht worden met behulp van een analyse van de golfvoort-

planting.

Merk allereerst op dat de differentiaalvergelijking (18) oplossingen heeft van de vorm:

$$c(x, \Delta t) = c_0 \exp[i(kx - \omega \Delta t)] \quad (25)$$

waarin:

$$c_0 = \text{evenwichtszoutgehalte (kg/m}^3\text{)}$$

$$k = \frac{2\pi}{L} = \text{golfgetal (m}^{-1}\text{)}$$

$$L = \text{golflengte (m)}$$

$$\omega = ku = \text{hoekfrequentie (s}^{-1}\text{)}$$

Om de nauwkeurigheid te onderzoeken wordt nu een beginvoorwaarde overeenkomstig met (25):

$$c(x, 0) = c_0 \exp(ikx) \quad (26)$$

opgelegd aan de differentievergelijking, waarbij de differenties worden uitgeschreven volgens een voorwaarts schema:

$$\frac{c_j^{t+1} - c_j^t}{\Delta t} + u \frac{c_{j+1}^t - c_{j-1}^t}{2\Delta x} = 0 \quad (27)$$

Merk op dat de beginvoorwaarde (26) in de punten $(x+\Delta x, 0)$ en $(x-\Delta x, 0)$ geschreven kan worden als:

$$c(x+\Delta x, 0) = c_0 \exp[ik(x+\Delta x)] \quad (28a)$$

$$c(x-\Delta x, 0) = c_0 \exp[ik(x-\Delta x)] \quad (28b)$$

Invullen van de beginvoorwaarden (26) en (28) en gebruik maken van:

$$\sigma = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (29)$$

waarin:

$$\sigma = \text{Courant-getal (dimensieloos)}$$

en van:

$$2i \sin(k\Delta x) = e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x} \quad (30)$$

resulteert in:

$$c_j^{t+1} = \rho c_j^t \quad (31)$$

waarin:

$$\rho = 1 - i\sigma \sin \xi \quad (32)$$

$$\xi = k\Delta x \quad (33)$$

De vermenigvuldigingsfactor ρ (niet te verwarren met de soortelijke massa ρ)

in (31) wordt de amplificatiefactor genoemd. Deze amplificatiefactor ρ is typerend voor het gebruikte differentieschema. Een tabel met uitdrukkingen voor de amplificatiefactoren behorend bij een aantal veelgebruikte differentieschema's is te vinden in VREUGDENHIL (1979), p. 43.

Bij nauwkeurighedsanalyses worden vergeleken amplitude en fase van de numerieke en de analytische oplossing na één periode, zie fig. 4. De analytische oplossing is dan ongedempt: de amplitude is nog steeds c_0 . De fase van de analytische oplossing is dan -2π .

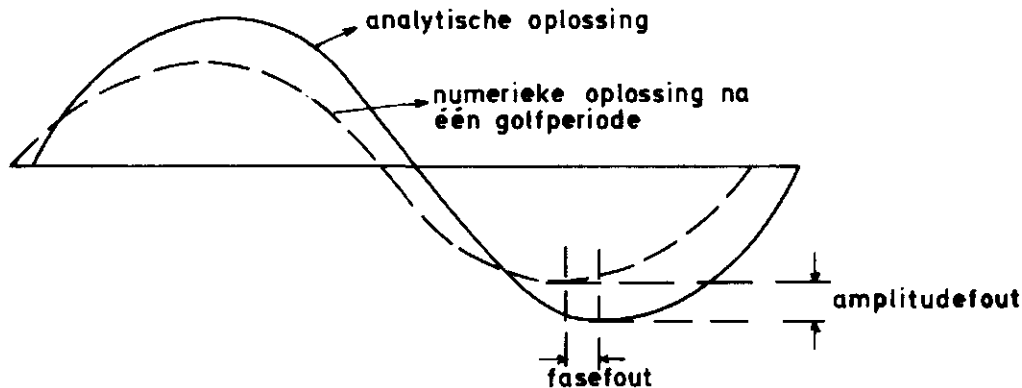


fig. 4: amplitude en fase van de numerieke en van de analytische oplossing.

Voor de numerieke oplossing geldt na één golfperiode voor de demping d_1 :

$$d_1 = |\rho|^{n_t} \quad (34)$$

waarin:

$$\begin{aligned} n_t &= \text{het aantal tijdstappen per golfperiode (dimensieloos)} \\ &= \frac{T}{\Delta t} = \frac{L}{u\Delta t} = 2\pi (\sigma\xi)^{-1} \end{aligned} \quad (35)$$

en voor de faseverschuiving f geldt dan:

$$f = n_t \arg(\rho) \quad (36)$$

We definiëren nu de volgende twee grootheden:

$$\text{- amplitudefactor } d = \frac{\text{demping}_{\text{num. opl.}}}{\text{demping}_{\text{an. opl.}}} = |\rho|^{n_t} \quad (37)$$

$$\text{- relatieve voortplantingssnelheid } c_R = \frac{\text{fase}_{\text{num. opl.}}}{\text{fase}_{\text{an. opl.}}} = \frac{1}{2\pi} n_t \arg(\rho) \quad (38)$$

Als nu een nauwkeurigheid ϵ gewenst wordt, moet kennelijk gelden:

$$|1-d| \leq \varepsilon \quad \text{en} \quad |1-c_R| \leq \varepsilon \quad (39)$$

Hieruit kunnen als volgt criteria voor stapgrootten afgeleid worden. Allereerst wordt, gebruik makend van:

$$\sin \xi \approx \xi \left(1 - \frac{1}{6} \xi^2\right) \quad (40)$$

de amplificatiefactor ρ volgens (32) geschreven als:

$$\rho = 1 - i\sigma\xi \left(1 - \frac{1}{6} \xi^2\right) \quad (41)$$

Nu kan de amplitudefactor d worden geschreven als:

$$d = \left| 1 - i\sigma\xi \left(1 - \frac{1}{6} \xi^2\right) \right|^{n_t} \quad (42)$$

Gebruikmakend van $n_t = \frac{2\pi}{\sigma\xi}$ en van de benaderingen:

$$\left(1 + \frac{b}{n}\right)^n \approx e^b \approx 1 + b \quad (43)$$

voor kleine waarden van b , volgt uit (42):

$$d \approx 1 + \pi\sigma\xi \quad (44)$$

Voor c_R volgt uit (38):

$$c_R \approx 1 + \frac{1}{6} \xi^2 (-1 - 2\sigma^2) \quad (45)$$

Bij de afleiding van (45) is gebruik gemaakt van:

$$\arg(\text{complex getal}) = \arctg \left(\frac{\text{irreëel deel}}{\text{reëel deel}} \right) \quad (46)$$

en:

$$\arctg x \approx x - \frac{1}{3} x^3 \quad (47)$$

Uit de nauwkeurigheidsvoorwaarden (39) volgt nu dat voor het behalen van een nauwkeurigheid ε met betrekking tot de amplitudefout voor het aantal roosterpunten per golflengte n_x , met:

$$n_x = \frac{L}{\Delta x} = \frac{2\pi}{k\Delta x} = 2\pi\xi^{-1} \rightarrow \xi = \frac{2\pi}{n_x} \quad (48)$$

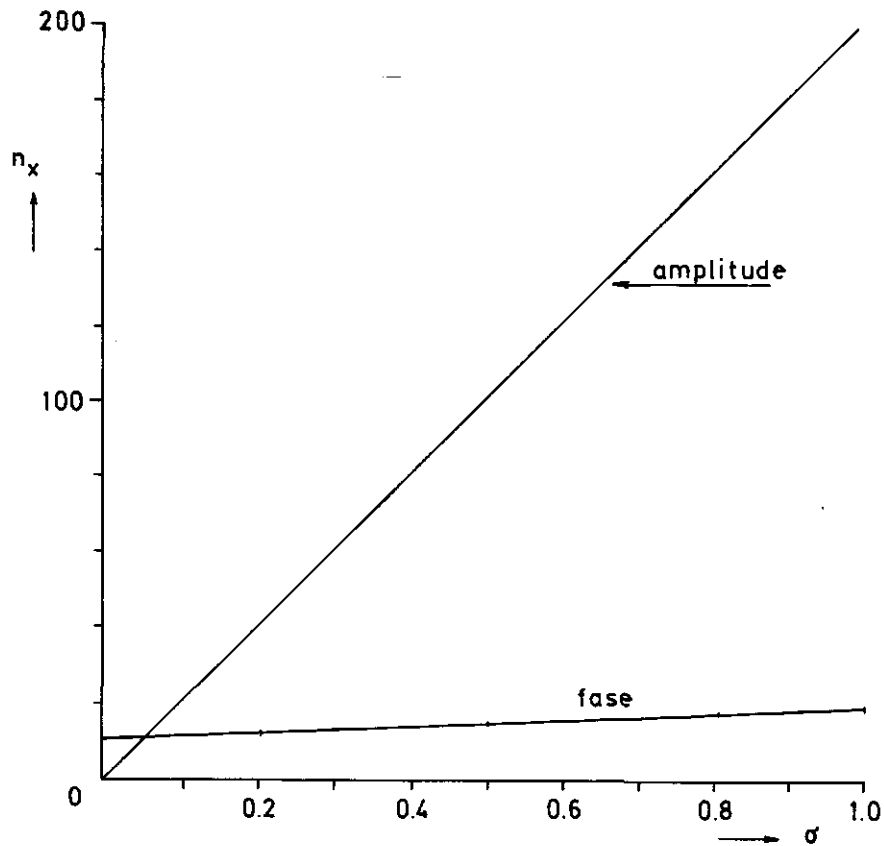
moet gelden, door invullen van (43) in (39):

$$\pi\sigma\xi \leq \varepsilon \rightarrow n_x \geq \frac{2\pi^2}{\varepsilon} \sigma \quad (49)$$

Op analoge wijze is af te leiden dat voor het behalen van een nauwkeurigheid ε met betrekking tot de fasefout moet gelden:

$$n_x \geq 2\pi \sqrt{|-2\sigma^2 - 1|} / 6\varepsilon \quad (50)$$

Beide relaties zijn afgebeeld in figuur 5 voor $\varepsilon = 0.05$.



figuur 5: benodigd aantal punten per golflengte (n_x) voor het behalen van een nauwkeurigheid $\varepsilon = 0.05$ bij het toepassen van een voorwaarts differentieschema op vlg. (18)

Voor de volledige zoutdiffusievergelijking, uitgewerkt volgens een voorwaarts differentieschema:

$$\frac{c_j^{t+1} - c_j^t}{\Delta t} + u \frac{c_{j+1}^t - c_{j-1}^t}{2\Delta x} - D \frac{c_{j+1}^t - 2c_j^t + c_{j-1}^t}{(\Delta x)^2} \quad (51)$$

blijkt de amplificatiefactor ρ te zijn (VREUGDENHIL, 1979; p. 93):

$$\rho = 1 + \lambda(\cos \xi - 1) - i\sigma \sin \xi \quad (52)$$

waarin:

$$\lambda = 2 \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}, \text{ dimensieloze diffusieparameter.}$$

Op grond van het op vergelijking (37) gebaseerde von Neumann criterium voor stabiliteit:

$$|\rho| \leq 1 \quad (53)$$

resulteert (52) in het stabiliteitscriterium:

$$\sigma^2 \leq \lambda \leq 1 \quad (54)$$

Dit is in te zien door met behulp van (52) ρ^2 te berekenen, waarbij verschillende waarden worden ingevuld voor σ^2 en λ . Uit het eerste deel van de voorwaarde (54) volgt (vergelijk met (24)):

$$\frac{u^2 \Delta t}{2D} \leq 1 \quad (55)$$

Het tweede deel van de voorwaarde (54), $\lambda \leq 1$, houdt verband met de omstandigheid dat voor een expliciete methode Δt niet veel groter mag zijn dan de tijd die nodig is om diffusie over één vak Δx tot stand te brengen. Beschouwing van de analytische oplossing (58) van de zoutdiffusievergelijking (zie hoofdstuk 4.3.) laat zien dat deze tijd t_d van de orde van grootte is:

$$t_d = \frac{(\Delta x)^2}{4D} \quad (56)$$

wat leidt tot de beperking op $\lambda = \Delta t / 2t_d$

Dat (56) geldt is in te zien door in (58) te stellen $t = t_d$; indien voor het gemak eveneens gesteld wordt $u = 0$, blijkt voor $x = \Delta x$ te gelden:

$$c(\Delta x, t_d) = f(\Delta x) e^{-1}$$

4.3. Keuze van de maatgevende golflengte

Terwijl bij de getijdenberekening de keuze van de maatgevende golflengte waarover de demping bekeken wordt, geen probleem is, is deze keuze bij zoutberekeningen minder voor de handliggend. In dat geval kan de maatgevende golflengte echter worden gevonden uit beschouwing van de overdrachtsfunctie.

De analytische oplossing of overdrachtsfunctie van:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (57)$$

in het geval dat een puntbron een hoeveelheid M loost ter plaatse $x = 0$ op tijdstip $t = 0$, luidt:

$$c(x, t) = \frac{M}{A} (4\pi Dt)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{(x-ut)^2}{4Dt} \right\} \quad (58)$$

In het geval dat aan (57) een periodieke randvoorwaarde wordt opgelegd van de vorm

$$c(0, t) = c_1 \exp(i\omega t) \quad (59)$$

geldt voor de overdrachtsfunctie

$$c(x, t) = c_1 \exp \left\{ -\frac{x}{L} + i\omega \left(t - \frac{x}{uc_R} \right) \right\} \quad (60)$$

waarin:

L = dempingslengte van de analytische oplossing (met een factor e^{-1})
(m)

c_R = relatieve voortplantingssnelheid t.o.v. u (dimensieloos)

Zoals we reeds zagen, geldt voor de amplificatiefactor ρ bij het uitwerken van de volledige zoutdiffusievergelijking volgens een voorwaarts differentieschema:

$$\rho \approx 1 + \lambda(\cos \xi - 1) - i\sigma \sin \xi \quad (61)$$

De eigenschappen van het numerieke schema worden nu vergeleken met de analytische oplossing (60) op het tijdstip t_R ("relaxatietijd"), waarop demping met een factor e^{-1} heeft plaatsgevonden van de analytische oplossing. Er geldt:

$$t_R = (k^2 D)^{-1} \quad (62)$$

Op tijdstip t_R is de faseverschuiving f van de analytische oplossing gelijk aan:

$$f = ukt_R \quad (63)$$

Dus geldt voor de amplitudefactor d :

$$d = e^{-|\rho|^{n_t}} \quad (64)$$

en voor de relatieve voorplantingssnelheid c_R :

$$c_R = - \frac{n_t \arg \rho}{ukt_R} = - \frac{n_x}{2\pi\sigma} \arg \rho \quad (65)$$

Gebruikmakend van (61) volgt nu:

$$d \approx 1 + \sigma^2/\lambda \quad (66)$$

$$c_R \approx 1 + \left(\frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{6} - \frac{1}{3}\sigma^2\right)\xi^2 \quad (67)$$

Invullen van (66) en (67) in de nauwkeurigheidsvoorwaarden (39) resulteert in resp.:

$$\frac{\sigma^2}{\lambda} = \frac{u^2 \Delta t}{2D} \leq \epsilon \quad (\text{vgl. met (24)}) \quad (68)$$

en

$$n_x \geq \left\{ \frac{2\pi^2}{3\epsilon} |3\lambda - 1 - 2\sigma^2| \right\}^{1/2} \quad (69)$$

Behalve met deze criteria moet bij bepaling van de stapgrootte dus ook nog rekening worden gehouden met (54), volgend uit stabiliteitsoverwegingen, en met het criterium volgens (24), dat volgt uit analyse van de afbreekfout. De criteria (24) en (68) zijn evenwel gelijklopend.

Het benodigd aantal punten per golflengte n_x bij uitwerken van de zoutdiffusievergelijking met een voorwaarts differentieschema, zoals dat door de vergelijkingen (68) en (69) wordt weergegeven, is afgebeeld in figuur 6 (overgenomen uit VREUGDENHIL (1979)), waarbij voor de nauwkeurigheid ϵ geldt:

$\epsilon = 0.05$. Opgemerkt hierbij dient te worden, dat volgens (69) n_x een functie is van zowel σ als λ . Voor λ geldt:

$$\lambda = 2 \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad (70)$$

en λ is dus niet alleen een functie van de verhouding van de stapgrootten Δx en Δt , zoals het Courant-getal σ , maar ook van Δx en daarmee in feite van n_x . Daarom is bij het afbeelden van de vergelijkingen (68) en (69) in figuur 6 gebruik gemaakt van een ander dimensieloos getal, het Pécletgetal P :

$$P = 2\pi u^2 (\omega D)^{-1} \quad (71)$$

Het blijkt nu mogelijk te zijn n_x uit te drukken als een functie van σ en P .

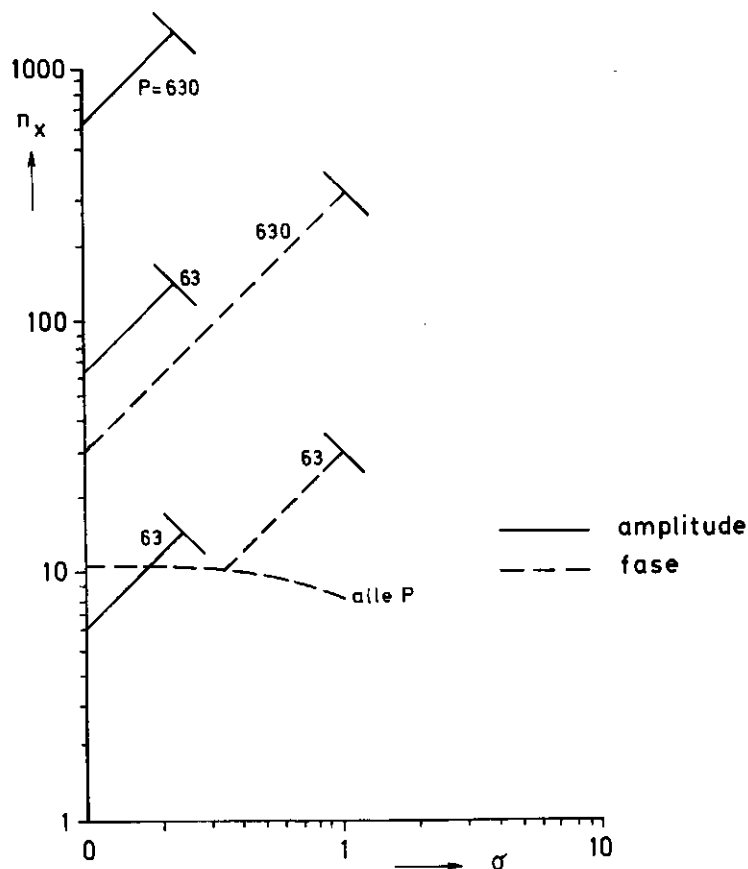


fig. 6: benodigd aantal punten per golflengte (n_x) voor het behalen van een nauwkeurigheid $\varepsilon = 0.05$ bij het uitwerken van de zoutdiffusievergelijking volgens (2) met een voorwaarts differentieschema (overgenomen uit VREUGDENHIL (1979), p. 96).

5. EEN VOORBEELD VAN EEN EXPLICIET REKENSHEMA

Veel expliciete rekenschema's lopen stuk op de zoutdiffusieberekening. Zo is het leap-frog schema onvoorwaardelijk instabiel. Omdat uit de criteria voor stapgrootte bovendien veelal kleinere stapgrootten voor de berekening van de zoutbeweging resulteren dan voor de berekening van de waterbeweging, is een impliciet rekenschema aan te bevelen, aangezien men met een en dezelfde schematisatie wil werken voor beide berekeningen.

Desondanks kan er soms een reden zijn die pleit voor het gebruik van een expliciet rekenschema, bijvoorbeeld de omvang van het kerngeheugen van de beschikbare computer. Een schema voor het advectioneel deel van de zoutdiffusievergelijking met zeer goede fase- en amplitudeeigenschappen is dat van Fromm (FROMM, 1968). Het schema bestaat uit een lineaire combinatie van een voorwaarts en een achterwaarts schema, waarbij negatieve faseeigenschappen worden gecompenseerd, een vaker toegepaste slimmigheid in de vloeistofmechanica berekeningen (vgl. het Lax-Wendroff schema, VREUGDENHIL, 1979).

Indien weer uitgegaan wordt van (62) is met behulp van een Taylor ontwikkeling te schrijven:

$$c_j^{t+1} = c_j^t + \frac{1}{2}(\alpha_j^t)^2 (c_{j+1}^t - 2c_j^t + c_{j-1}^t) + \frac{1}{2}\alpha_j^t (c_{j-1}^t - c_{j+1}^t) \quad (72)$$

met:

$$\alpha_j^t = (u_j^t \Delta t) / \Delta x \quad (\text{dimensieloos})$$

$$u_j^t = \text{stroomsnelheid in het punt } j \text{ op tijdstip } t \text{ (m/s)}$$

Vergelijking (72) wordt gecombineerd met een achterwaarts schema met tegengestelde fasefout.

$$c_j^{t+1} = c_{j-1}^t + \frac{\alpha_j^t - 1}{2} (c_{j-2}^t - c_j^t) + \frac{(\alpha_j^t - 1)^2}{2} (c_{j-2}^t - 2c_{j-1}^t + c_j^t) \quad (73)$$

Eenzelfde lineaire combinatie is te maken met een 4^e orde benadering. Fase- en amplitudeeigenschappen zijn dan bijna perfect. Als appendix is opgenomen een listing van een berekeningssubroutine voor een 2^e of 4^e orde (naar keuze) Frommschema, met voor het diffusief transport een 2^e orde benadering. Opgemerkt kan nog worden, dat met een "fractional time step" procedure gerekend wordt, waarbij de resultaten van de eerste berekeningsstap, het advectioneel transport, gebruikt worden als oude waarden in de tweede berekeningsstap, waarin het diffusieve transport wordt berekend. Voor een evaluatie van de numerieke eigenschappen van het schema van Fromm, zie VERBOOM (1974) en ROACHE (1976).

6. EEN WISKUNDIG MODEL OF NIET?

Een veel voorkomend probleem is het vaststellen van de irrigatiecapaciteit van rivieren, waarbij de bepaling van de ligging van het zoutfront, bijvoorbeeld gedefinieerd als de plaats waar het zoutgehalte van de rivier op 300 mg Cl^- per liter ligt, een cruciaal aspect is. Een tweetal benaderingen is gebruikelijk, als er geen gebruik wordt gemaakt van wiskundige modellen. Allereerst het vaststellen van de ligging van het zoutfront als functie van de afstand tot de monding van het estuarium en het bovenstrooms debiet. Dit gebeurt op basis van de gegevens van "zouttrips", waarbij met de getijgolf mee wordt gevaren op de rivier, en waarbij op een aantal punten monsters van het rivierwater worden genomen, waarvan het zoutgehalte wordt bepaald. Een voorbeeld van een dergelijke functie, voor de Corantijn rivier in Suriname, is afgebeeld in figuur 7. Bij de tweede methode worden decadegemiddelden bepaald van het zoutgehalte, zoals die voor sommige punten langs het estuarium zijn bepaald, zie figuur 8 voor een voorbeeld (eveneens voor de Corantijn rivier; plaats: Mac Clemen, ongeveer 50 km van de monding).

De tweede methode heeft als voordeel dat met vrij grote stelligheid een uitspraak kan worden gedaan over de ligging van het zoutfront, namelijk al dan niet bovenstrooms van een bepaald punt (niet waar het werkelijk zal liggen). Ook heeft de tweede methode als voordeel dat de benodigde metingen routinematig op te zetten zijn. Maar zoals in figuur 8 te zien is, is de spreiding van de punten groot, zodat slechts een omhullende te tekenen is, die niet extrapolerbaar is.

Voor beide methoden gelden als tekortkomingen:

- (a) de invloed van de getijamplitude aan de monding is moeizaam (bij de zouttrips) of geheel niet te incorporeren (bij de tweede methode).
- (b) het verband van het plaatselijk zoutgehalte met de bovenafvoer - andere variabelen buiten beschouwing gelaten - is zeker niet eenduidig, omdat de "time-lag" tussen een optredende bovenafvoer en het moment waarop deze invloed krijgt op het zoutgehalte, varieert. Vooral bij lage afvoeren kan het geruime tijd duren, voordat er een evenwichtssituatie ontstaat.
- (c) het hierboven genoemde punt (b) beïnvloedt de extrapolatiemogelijkheden naar lage bovenafvoeren, waarin men juist geïnteresseerd is, ongunstig, en dit wordt nog versterkt doordat bij lage bovenafvoeren het mechanisme van de zoutindringing een ander karakter krijgt. Bij lage bovenafvoeren zal de zoutindringing namelijk alleen middels menging plaatsvinden, en daardoor minder

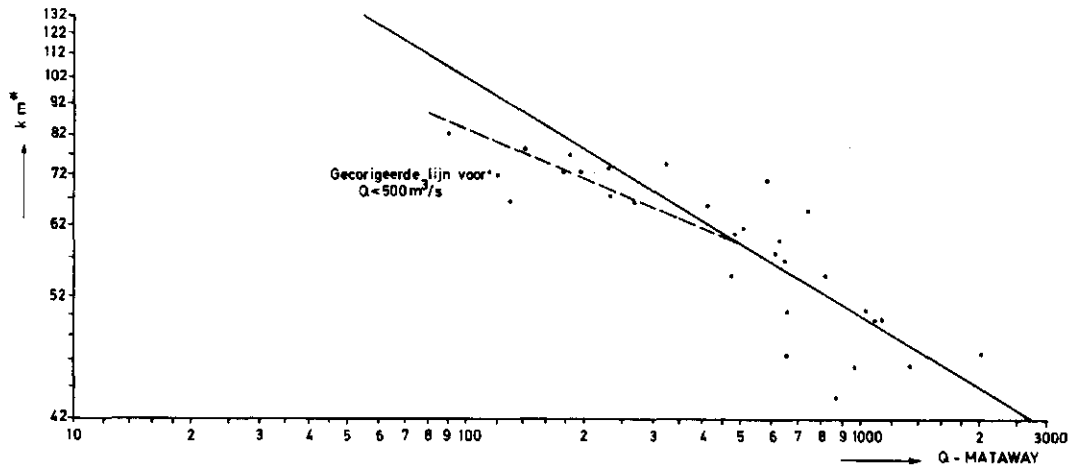


fig. 7: plaats van de zoutgrens (300 mg Cl/l) in de Corantijn rivier als functie van de afvoer te Mataway

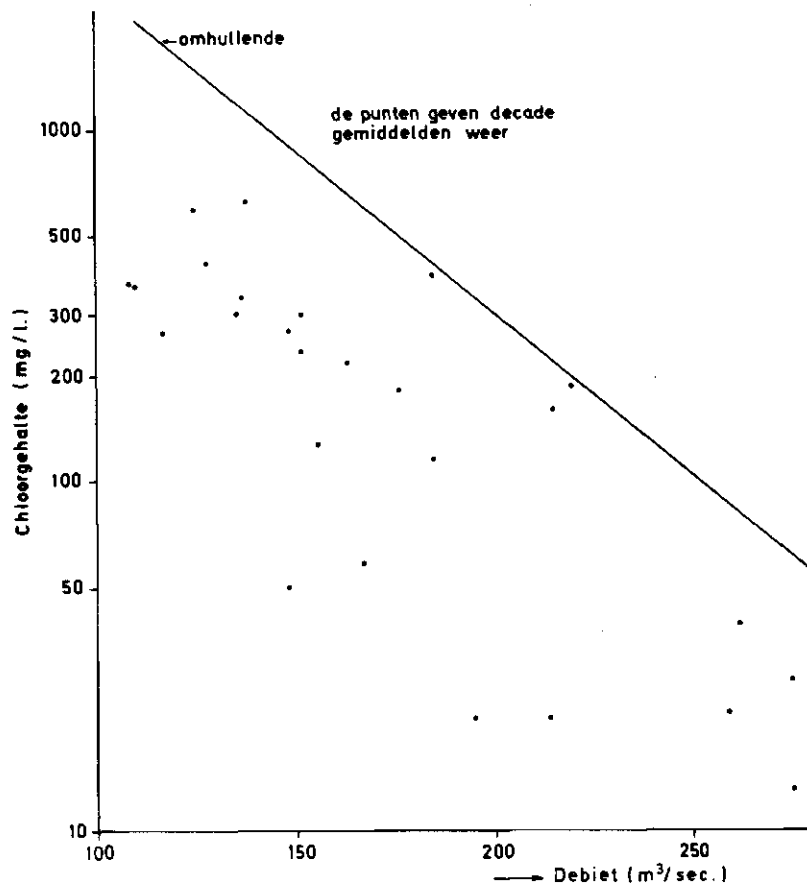


fig. 8: relatie tussen het gemiddeld chloorgehalte te Mac Clemen en het debiet te Matappi

sterk zijn dan in het geval dat de indringing ook gepaard gaat met een dichtheidsstroming.

Deze stroming ontstaat indien in het estuarium sprake is van een grote dichtheidsgradiënt in de verticaal. De dichtheidsstroming heeft tot gevolg dat het relatief zwaardere zoute water langs de bodem de rivier wordt opgebracht. Het effect van de punten (b) en (c) voor de zoutindringing in de Corantijn rivier kan afgelezen worden uit het geknikte verloop van de lijn in figuur 7.

- (d) de invloed van morfologische wijzigingen in de rivierbedding kan niet nagegaan worden.
- (e) de invloed van lozing en onttrekking van zoet water in de mengzone is evenmin na te gaan.

Desondanks kunnen beide methoden een redelijk antwoord geven bij niet al te gecompliceerde vraagstellingen. Bovendien vereisen zij aanmerkelijk minder investeringen (in modelbouw, en in de geweldige hoeveelheid benodigde additionele gegevens: ter calibratie van parameters in het model, voor verificatie, voor schematisatie van het estuarium, etc.) dan methoden die berusten op het gebruik van wiskundige modellen. Ook zullen metingen die aan een van beide methoden ten grondslag liggen, sowieso voortgezet moeten worden, ook nadat een wiskundig model beschikbaar is: een estuarium is nu eenmaal geen statisch systeem, en gemeten grootheden zijn betrouwbaarder dan hun berekende "equivalenten".

7. LITERATUUR

- ALLERSMA, E. (1973): "Hydraulics of open-water management", WL Publication 100, Delft Hydraulics Laboratory, Delft.
- FROMM, J.E. (1968): "A method for reducing dispersion in convective difference schemes", J. Comp. Physics 3, pp. 179-189.
- GRIJSEN, J.G. (1971): "Een directe, impliciete methode voor de berekening van de niet-permanente stroming in open leidingen", ing. scriptie Hydraulica en Afvoerhydrologie, Landbouwhogeschool, Wageningen.
- ROACHE, J.P. (1976): "Computational fluid dynamics", Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico.
- THATCHER, M.L., HARLEMAN, D.R.F. (1972a): "A mathematical model for the prediction of unsteady salinity intrusion in estuaries", NTIS, Springfield.
- THATCHER, M.L., HARLEMAN, D.R.F. (1972b): "Prediction of unsteady salinity intrusion in estuaries; mathematical model and user's manual", NTIS, Springfield.
- VERBOOM, G.K. (1974): "Transverse mixing in rivers; a numerical approach", W.L. Publication 117, Delft Hydraulics Laboratory, Delft.
- VREUGDENHIL, C.B. (1979): "Waterloopkundige berekeningen 1", Technische Hogeschool, Delft.
- WARMERDAM, P.M.M. (1971): "Niet-stationaire waterstroming in open waterlopen", N.V. Heidemaatschappij Beheer, afd. Speurwerk, Arnhem.
- WITTER, J.V. (1978): "Het schematiseren van estuaria", Waterloopkundige Afdeling, Paramaribo.
- WITTER, J.V. (1979): "Handleiding voor het gebruik van het programma GETY", Waterloopkundige Afdeling, Paramaribo.

Appendix: FROMM.FOR, subroutine ter berekening van advectief (volgens schema van Fromm, 2^e en 4^e orde benadering) en dispersief transport van zout

```

TY FROMM.FOR
C*****
C
C   PROGRAM DETERMINES ADVECTIVE AND DIFFUSIVE TRANSPORT
C
C   INPUT (FILE:INPUT.DAT; UNIT NUMBER:1):
C   IF OPTN1=1, THE FOURTH ORDER SCHEME OF FROMM IS CHOSEN
C   IF OPTN2=1, THE SECOND ORDER TERM IS INCLUDED IN THE FINITE
C   DIFFERENCE APPROXIMATION OF THE DIFFUSIVE TRANSPORT
C   IF OPTN3=1, ONLY THE ADVECTIVE TRANSPORT IS CALCULATED
C
C   DT=TIME STEP (S)
C   DX=DISTANCE STEP(M)
C   C(.)=INITIAL SALT CONCENTRATION IN THE UPSTREAM 56 POINTS
C   Y(.)=HEADING (4 LINES)
C   U=STREAM VELOCITY (M/S), CONSTANT OVER THE LENGTH OF THE
C   CHANNEL
C   D=DISPERSION COEFFICIENT(M2/S), CONSTANT OVER THE LENGTH OF
C   THE CHANNEL
C
C   NOTES:
C   -THERE ARE 200 POINTS IN SPACE
C   -1000 TIME STEPS ARE CALCULATED
C   -BECAUSE BOUNDARY CONDITIONS ARE FIXED (I.E. 0) CARE
C   SHOULD BE TAKEN IN SELECTING U AND D(GIVEN DX AND DT)
C   -CT1(.)=NEWLY CALCULATED SALT CONCENTRATION, REGARDING
C   ONLY THE ADVECTIVE TRANSPORT
C   -CT(.)=NEWLY CALCULATED SALT CONCENTRATION, COMBINING THE
C   EFFECTS OF ADVECTIVE AND (IF ANY) DIFFUSIVE TRANSPORT
C
C   REF.: FROMM,J.E.(1968):J. COMP. PHYS. 3, PP 179-189
C   (1969):PHYS. FLUIDS SUPPL. 12, PP III3-
C   III2
C   VERBOOM,G.K.(1974): DHL PUBL. 117
C
C   120782                               J.V. WITTER
C
C*****
C
C   REAL NOEMER
C   DIMENSION C(200),CT(200),CT1(200),Y(80)
C   OPEN(UNIT=1,DEVICE='DSK',ACCESS='SEQIN',FILE='INPUT.DAT')
C   OPEN(UNIT=2,DEVICE='DSK',ACCESS='SEQOUT',FILE='OUTPUT.DAT')
C   T=0.
C   READ(1,94) (Y(I),I=1,80)
94   FORMAT(20A4)
C   WRITE(5,95) (Y(I),I=1,80)
95   FORMAT(1X,20A4)
C   WRITE(5,96)
96   FORMAT(///)
C   READ(1,21) OPTN1,OPTN2,OPTN3
C   WRITE(5,22) OPTN1,OPTN2,OPTN3
21   FORMAT(3(5X,F5.0))
22   FORMAT(1X,'OPTN1=',F5.0,' OPTN2=',F5.0,' OPTN3=',F5.0,/)
C   READ(1,21) DT,DX
C   WRITE(5,23) DT,DX
23   FORMAT(1X,'DT=',F5.0,'SEC.', ' DX=',F5.0,'M.',/)
C   READ(1,3) U,D
C   WRITE(5,25) U,D
3   FORMAT(2(5X,F5.1))
25   FORMAT(1X,'U=',F5.1,'M/SEC.   D=',F5.1,'M2/SEC.',/)
C   ALPHA=(U*DT)/DX

```

```

L
C----- INITIAL CONDITIONS
C
      READ(1,1) (C(I),I=1,56)
      WRITE(5,24)
24     FORMAT(' INITIAL CONDITIONS IN THE FIRST 56 POINTS ARE:')
      WRITE(5,1) (C(I),I=1,56)
1      FORMAT(8F6.2)
      WRITE(5,96)
      DO 2 I=57,200
2         C(I)=0.
C
C----- BOUNDARY CONDITIONS
C
      READ(1,4) CT(1),CT(200),CT1(1),CT1(200)
4      FORMAT(4(5X,F5.0))
C
C----- SOLVING THE ADVECTIVE TRANSPORT WITH FROMM'S SCHEME
C
      ALPH2=ALPHA**2
      ALPH3=ALPH2-2.*ALPHA
      ALP3=ALPH2*ALPHA
      ALPH4=ALPHA**4
      X1=((7./12.)*ALPHA)-((1./12.)*ALP3)
      X2=((15./24.)*ALPH2)-((3./24.)*ALPH4)
      X3=((1./12.)*ALP3)-((1./12.)*ALPHA)
      X4=((1./24.)*ALPH4)-((1./24.)*ALPH2)
      ALF=ALPHA-1.
      ALF2=ALF**2
      ALF3=ALF2*ALF
      ALF4=ALF**4
      Y1=((7./12.)*ALF)-((1./12.)*ALF3)
      Y2=((15./24.)*ALF2)-((3./24.)*ALF4)
      Y3=((1./12.)*ALF3)-((1./12.)*ALF)
      Y4=((1./24.)*ALF4)-((1./24.)*ALF2)
8      CONTINUE
      IF(OPTN1.EQ.1.) GO TO 9
      DO 5 I=3,198
5      CT1(I)=C(I)+0.25*ALPHA*(C(I-1)-C(I+1)+C(I-2)-C(I)) +
1         0.25*ALPH2*(C(I-1)-2.*C(I)+C(I+1)) + 0.25*ALPH3*(
2         C(I-2)-2.*C(I-1)+C(I))
      GO TO 10
9      DO 11 I=4,198
      FNEG=X1*(C(I-1)+C(I)) + X2*(C(I-1)-C(I)) + X3*(C(I-2)+C(I+1))
1         + X4*(C(I-2)-C(I+1))
      FPOS=X1*(C(I)+C(I+1)) + X2*(C(I)-C(I+1)) +
1         X3*(C(I-1)+C(I+2)) + X4*(C(I-1)-C(I+2))
      XFNEG=Y1*(C(I-2)+C(I-1)) + Y2*(C(I-2)-C(I-1)) +
1         Y3*(C(I-3)+C(I)) + Y4*(C(I-3)-C(I))
      XFPOS=Y1*(C(I-1)+C(I)) + Y2*(C(I-1)-C(I)) +
1         Y3*(C(I-2)+C(I+1)) + Y4*(C(I-2)-C(I+1))
      CT1(I)=0.5*(C(I-1)+C(I)) + 0.5*(XFNEG+FNEG-XFPOS-FPOS)
11     CONTINUE
      I=3
      CT1(I)=C(I) + 0.25*ALPHA*(C(I-1)-C(I+1)+C(I-2)-C(I)) +
1         0.25*ALPH2*(C(I-1)-2.*C(I)+C(I+1)) + 0.25*ALPH3*(
2         C(I-2)-2.*C(I-1)+C(I))
10     CONTINUE
C
C----- NEAR THE BOUNDARIES FROMM'S SCHEME CAN'T BE USED
C
      I=2
      CT1(I)=C(I) - (U*(C(I+1)-C(I-1)))/(2.*DX))*DT
      I=199
      CT1(I)=C(I) - (U*(C(I+1)-C(I-1)))/(2.*DX))*DT
      IF(OPTN3.EQ.1.) GO TO 60

```

```

C
C----- SOLVING THE DIFFUSIVE TRANSPORT WITH A NORMAL 2-ORDER SCHEME
C
      DX2=DX*DX
      DO 6 I=2,199
      ORDR1=D*((CT1(I-1))-2.*CT1(I)+CT1(I+1))/DX2)*DT
      ORDR2=0.
      IF(OPTN2.NE.1.) GO TO 16
C
C----- IN POINTS 2 AND 199 THE 2-ORDER TERM CAN'T BE DETERMINED
C
      IF(I.EQ.2.OR.I.EQ.199) GO TO 16
      ORDR2=D*D*0.5*((CT1(I-2))-4.*CT1(I-1)+6.*CT1(I)-4.*CT1(I+1)
1      +CT1(I+2))/(DX2*DX2))*DT*DT
16     CONTINUE
6      CT(I)=CT1(I) + ORDR1 + ORDR2
      DO 7 I=2,199
7      C(I)=CT(I)
      GO TO 61
60     DO 62 I=2,199
62     C(I)=CT1(I)
61     CONTINUE
      NOEMER=100.*DT
      DUMMY1=T/NOEMER
      IDUM=IFIX(T)/IFIX(NOEMER)
      DUMMY2=FLOAT(IDUM)
      IF((DUMMY1-DUMMY2).GT.0.00005) GO TO 14
      WRITE(5,15) T
      WRITE(2,15) T
      WRITE(2,17) (C(I),I=1,200)
15     FORMAT(3X,F7.0)
17     FORMAT(10F10.4)
14     T=T+DT
      IF(T.LE.1000.*DT) GO TO 8
C
C----- OUTPUT OF FINAL RESULTS
C
      WRITE(5,99)
      WRITE(5,90)
99     FORMAT(' AFTER 1000 TIME STEPS CONCENTRATIONS ARE:')
90     FORMAT(4('      PNT      CONC '))
      DO 81 I=1,200,4
      IA=I
      IB=I+1
      IC=I+2
      ID=I+3
      WRITE(5,12) IA,C(IA),IB,C(IB),IC,C(IC),ID,C(ID)
12     FORMAT(4(7X,I3,F10.4))
81     CONTINUE
      STOP
      END

```


0.
 XFRSAPR Floating underflow PC= 2210
 XFRSAPR Floating underflow PC= 2170

1500.
 3000.
 4500.
 6000.
 7500.
 9000.
 10500.
 12000.
 13500.
 15000.

AFTER 1000 TIME STEPS CONCENTRATIONS ARE:

PNT	CONC	PNT	CONC	PNT	CONC	PNT	CONC
1	0.0000	2	0.0000	3	-0.0000	4	-0.0000
5	0.0000	6	0.0000	7	-0.0000	8	0.0000
9	0.0000	10	-0.0000	11	-0.0000	12	0.0000
13	0.0000	14	-0.0000	15	0.0000	16	0.0000
17	-0.0000	18	-0.0000	19	0.0000	20	0.0000
21	-0.0000	22	-0.0000	23	0.0000	24	-0.0000
25	-0.0000	26	0.0000	27	0.0000	28	-0.0000
29	-0.0000	30	0.0000	31	0.0000	32	-0.0000
33	-0.0000	34	0.0000	35	0.0000	36	-0.0000
37	-0.0000	38	-0.0000	39	0.0000	40	0.0000
41	-0.0000	42	-0.0000	43	0.0000	44	0.0000
45	-0.0000	46	-0.0000	47	0.0000	48	0.0000
49	-0.0000	50	-0.0000	51	0.0000	52	0.0000
53	-0.0000	54	-0.0000	55	0.0000	56	0.0000
57	-0.0000	58	-0.0000	59	0.0000	60	0.0000
61	-0.0000	62	-0.0000	63	0.0000	64	0.0000
65	0.0000	66	-0.0000	67	-0.0000	68	0.0000
69	0.0000	70	-0.0000	71	-0.0000	72	0.0000
73	0.0000	74	0.0000	75	-0.0000	76	-0.0000
77	0.0000	78	0.0000	79	0.0000	80	-0.0000
81	-0.0000	82	0.0000	83	0.0000	84	0.0000
85	-0.0000	86	-0.0000	87	0.0000	88	0.0001
89	0.0001	90	-0.0001	91	-0.0004	92	-0.0004
93	0.0003	94	0.0013	95	0.0018	96	0.0005
97	-0.0029	98	-0.0063	99	-0.0062	100	0.0020
101	0.0231	102	0.0624	103	0.1295	104	0.2424
105	0.4306	106	0.7345	107	1.2000	108	1.8675
109	2.7589	110	3.8648	111	5.1354	112	6.4783
113	7.7652	114	8.8499	115	9.5930	116	9.8917
117	9.7025	118	9.0518	119	8.0297	120	6.7693
121	5.4192	122	4.1154	123	2.9616	124	2.0185
125	1.3040	126	0.8011	127	0.4706	128	0.2656
129	0.1430	130	0.0706	131	0.0287	132	0.0061
133	-0.0032	134	-0.0043	135	-0.0017	136	0.0010
137	0.0020	138	0.0015	139	0.0004	140	-0.0003
141	-0.0005	142	-0.0002	143	0.0000	144	0.0001
145	0.0001	146	0.0000	147	-0.0000	148	-0.0000
149	-0.0000	150	0.0000	151	0.0000	152	0.0000
153	-0.0000	154	-0.0000	155	-0.0000	156	0.0000
157	0.0000	158	-0.0000	159	-0.0000	160	-0.0000
161	0.0000	162	0.0000	163	0.0000	164	-0.0000
165	-0.0000	166	-0.0000	167	0.0000	168	0.0000
169	0.0000	170	-0.0000	171	-0.0000	172	0.0000
173	0.0000	174	0.0000	175	-0.0000	176	-0.0000
177	0.0000	178	0.0000	179	0.0000	180	-0.0000
181	-0.0000	182	-0.0000	183	0.0000	184	0.0000
185	-0.0000	186	-0.0000	187	-0.0000	188	0.0000
189	0.0000	190	-0.0000	191	-0.0000	192	-0.0000
193	0.0000	194	0.0000	195	-0.0000	196	-0.0000
197	0.0000	198	0.0000	199	0.0000	200	0.0000

STOP

0.
 XFRSAPR Floating underflow PC= 2140
 XFRSAPR Floating underflow PC= 2147

1500.
 3000.
 4500.
 6000.
 7500.
 9000.
 10500.
 12000.
 13500.
 15000.

AFTER 1000 TIME STEPS CONCENTRATIONS ARE:

PNT	CONC	PNT	CONC	PNT	CONC	PNT	CONC
1	0.0000	2	0.0000	3	0.0000	4	-0.0000
5	-0.0000	6	-0.0000	7	0.0000	8	0.0000
9	0.0000	10	0.0000	11	-0.0000	12	-0.0000
13	-0.0000	14	0.0000	15	0.0000	16	0.0000
17	-0.0000	18	-0.0000	19	-0.0000	20	0.0000
21	0.0000	22	0.0000	23	0.0000	24	-0.0000
25	-0.0000	26	-0.0000	27	0.0000	28	0.0000
29	0.0000	30	-0.0000	31	-0.0000	32	-0.0000
33	-0.0000	34	0.0000	35	0.0000	36	0.0000
37	-0.0000	38	-0.0000	39	-0.0000	40	0.0000
41	0.0000	42	0.0000	43	-0.0000	44	-0.0000
45	-0.0000	46	-0.0000	47	0.0000	48	0.0000
49	0.0000	50	-0.0000	51	-0.0000	52	-0.0000
53	0.0000	54	0.0000	55	0.0000	56	-0.0000
57	-0.0000	58	-0.0000	59	0.0000	60	0.0000
61	0.0000	62	0.0000	63	-0.0000	64	-0.0000
65	-0.0000	66	0.0000	67	0.0000	68	0.0000
69	-0.0000	70	-0.0000	71	-0.0000	72	-0.0000
73	0.0000	74	0.0000	75	0.0000	76	-0.0000
77	-0.0000	78	-0.0000	79	-0.0000	80	0.0000
81	0.0000	82	0.0000	83	0.0000	84	-0.0000
85	-0.0000	86	-0.0000	87	-0.0000	88	0.0000
89	0.0000	90	0.0001	91	0.0001	92	0.0001
93	-0.0002	94	-0.0007	95	-0.0015	96	-0.0025
97	-0.0031	98	-0.0021	99	0.0031	100	0.0170
101	0.0464	102	0.1023	103	0.1995	104	0.3578
105	0.6012	106	0.9554	107	1.4453	108	2.0890
109	2.8923	110	3.8423	111	4.9036	112	6.0163
113	7.0997	114	8.0594	115	8.7996	116	9.2368
117	9.3135	118	9.0095	119	8.3460	120	7.3844
121	6.2171	122	4.9537	123	3.7046	124	2.5653
125	1.6050	126	0.8604	127	0.3364	128	0.0111
129	-0.1545	130	-0.2069	131	-0.1908	132	-0.1431
133	-0.0894	134	-0.0445	135	-0.0138	136	0.0030
137	0.0095	138	0.0099	139	0.0075	140	0.0046
141	0.0023	142	0.0008	143	0.0000	144	-0.0003
145	-0.0004	146	-0.0004	147	-0.0003	148	-0.0002
149	-0.0001	150	0.0000	151	0.0000	152	0.0001
153	0.0000	154	0.0000	155	0.0000	156	-0.0000
157	-0.0000	158	-0.0000	159	-0.0000	160	0.0000
161	0.0000	162	0.0000	163	0.0000	164	0.0000
165	-0.0000	166	-0.0000	167	-0.0000	168	-0.0000
169	0.0000	170	0.0000	171	0.0000	172	0.0000
173	-0.0000	174	-0.0000	175	-0.0000	176	-0.0000
177	0.0000	178	0.0000	179	0.0000	180	0.0000
181	-0.0000	182	-0.0000	183	-0.0000	184	-0.0000
185	0.0000	186	0.0000	187	0.0000	188	0.0000
189	-0.0000	190	-0.0000	191	-0.0000	192	0.0000
193	0.0000	194	0.0000	195	0.0000	196	-0.0000
197	-0.0000	198	-0.0000	199	0.0000	200	0.0000

STOP

0.
 %FRSAPR Floating underflow PC= 2374
 %FRSAPR Floating underflow PC= 2140

1500.
 3000.
 4500.
 6000.
 7500.
 9000.
 10500.
 12000.
 13500.
 15000.

AFTER 1000 TIME STEPS CONCENTRATIONS ARE:

PNT	CONC	PNT	CONC	PNT	CONC	PNT	CONC
1	0.0000	2	0.0000	3	-0.0000	4	-0.0000
5	-0.0000	6	+0.0000	7	0.0000	8	0.0000
9	0.0000	10	-0.0000	11	-0.0000	12	-0.0000
13	0.0000	14	0.0000	15	0.0000	16	0.0000
17	-0.0000	18	-0.0000	19	-0.0000	20	0.0000
21	0.0000	22	0.0000	23	-0.0000	24	-0.0000
25	-0.0000	26	0.0000	27	0.0000	28	0.0000
29	0.0000	30	-0.0000	31	-0.0000	32	-0.0000
33	0.0000	34	0.0000	35	0.0000	36	-0.0000
37	-0.0000	38	-0.0000	39	0.0000	40	0.0000
41	0.0000	42	0.0000	43	-0.0000	44	-0.0000
45	-0.0000	46	0.0000	47	0.0000	48	0.0000
49	-0.0000	50	-0.0000	51	-0.0000	52	0.0000
53	0.0000	54	0.0000	55	0.0000	56	-0.0000
57	-0.0000	58	-0.0000	59	0.0000	60	0.0000
61	0.0000	62	-0.0000	63	-0.0000	64	-0.0000
65	0.0000	66	0.0000	67	0.0000	68	0.0000
69	-0.0000	70	-0.0000	71	-0.0000	72	0.0000
73	0.0000	74	0.0000	75	0.0000	76	-0.0000
77	-0.0000	78	-0.0000	79	0.0000	80	0.0000
81	0.0000	82	0.0000	83	-0.0000	84	-0.0000
85	-0.0000	86	-0.0000	87	0.0000	88	0.0000
89	0.0000	90	0.0001	91	0.0001	92	-0.0000
93	-0.0003	94	-0.0008	95	-0.0016	96	-0.0022
97	-0.0022	98	0.0002	99	0.0077	100	0.0252
101	0.0601	102	0.1235	103	0.2305	104	0.4006
105	0.6565	106	1.0225	107	1.5208	108	2.1666
109	2.9630	110	3.8951	111	4.9268	112	6.0000
113	7.0377	114	7.9511	115	8.6512	116	9.0609
117	9.1280	118	8.8344	119	8.2006	120	7.2835
121	6.1691	122	4.9591	123	3.7564	124	2.6509
125	1.7090	126	0.9676	127	0.4337	128	0.0901
129	-0.0977	130	-0.1717	131	-0.1737	132	-0.1388
133	-0.0927	134	-0.0509	135	-0.0203	136	-0.0020
137	0.0064	138	0.0084	139	0.0071	140	0.0048
141	0.0027	142	0.0011	143	0.0002	144	-0.0002
145	-0.0003	146	-0.0003	147	-0.0003	148	-0.0002
149	-0.0001	150	-0.0000	151	0.0000	152	0.0000
153	0.0000	154	0.0000	155	0.0000	156	-0.0000
157	-0.0000	158	-0.0000	159	-0.0000	160	-0.0000
161	0.0000	162	0.0000	163	0.0000	164	0.0000
165	-0.0000	166	-0.0000	167	-0.0000	168	-0.0000
169	-0.0000	170	0.0000	171	0.0000	172	0.0000
173	0.0000	174	-0.0000	175	-0.0000	176	-0.0000
177	-0.0000	178	0.0000	179	0.0000	180	0.0000
181	0.0000	182	-0.0000	183	-0.0000	184	-0.0000
185	0.0000	186	0.0000	187	0.0000	188	0.0000
189	-0.0000	190	-0.0000	191	-0.0000	192	-0.0000
193	0.0000	194	0.0000	195	0.0000	196	-0.0000
197	-0.0000	198	-0.0000	199	-0.0000	200	0.0000

STOP