

STÅBI i grundvandsmodellering

H.J. Henriksen, J.C. Refsgaard, T.O. Sonnenborg,
P. Gravesen, A. Brun, A. Refsgaard
og K.H. Jensen



STÅBI i grundvandsmodellering

H.J. Henriksen, J.C. Refsgaard, T.O. Sonnenborg, P. Gravesen, GEUS
A. Brun, A. Refsgaard, Institut for Vand og Miljø, DHI
K.H. Jensen, DTU/ISVA

Indhold

Kapitel 0. Indledning.....	0-1
0.1 Baggrund og formål.....	0-1
0.2 Terminologi og modelcyklus.....	0-2
0.3 Modelprotokol.....	0-5
0.4 Parter og rollefordeling.....	0-8
0.5 Referencer.....	0-10
Kapitel 1. Matematisk og numerisk grundlag for grundvandsmodellering.....	1-1
1.1 Tre-dimensionale strømningss ligning.....	1-1
1.2 To-dimensionale strømningss ligning.....	1-4
1.3 Forudsætninger for løsning af partielle differentia lligninger.....	1-5
1.4 Numerisk diskretisering.....	1-6
1.5 Formulering af differensligninger.....	1-10
1.6 Referencer.....	1-11
Kapitel 2. Formålet med opstilling af modeller.....	2-1
2.1 Hvordan kan modeller anvendes i forbindelse med zoner ing?.....	2-1
2.2 Brug af model som fortolkningsværktøj.....	2-3
2.3 Brug af model som prognoseværktøj.....	2-3
2.4 Hvilke spørgsmål skal modellen give svar på – definition af formål.....	2-4
2.5 Er valg af en numerisk grundvandsmodel det rigtige værktøj til besvarelse af disse spørgsmål?.....	2-5
2.6 Referencer.....	2-6
Kapitel 3. Opstilling af geologisk model.....	3-1
3.1 Indledning.....	3-1
3.2 Jordoverfladens topografi og geomorfologi.....	3-2
3.3 Prækvartær overfladens højdeforhold.....	3-2
3.4 Sediment/bjergarts enheder.....	3-3
3.5 Datatyper.....	3-3
3.6 Modeltyper.....	3-4
3.7 Korrelation af lagfølgeoplysninger fra boringer.....	3-5
3.8 Forbedring af geologisk model ud fra overfladegeofysik.....	3-6
3.9 Detaljer i en geologisk model.....	3-6
3.10 Usikkerheder på geologisk model.....	3-7
3.11 Praktiske eksempler på tolkning af hydrogeologiske modeller.....	3-7
3.12 Referencer.....	3-8
Kapitel 4. Opstilling af hydrogeologisk tolkningsmodel.....	4-1
4.1 Definition.....	4-1
4.2 Afgrænsning af område.....	4-1
4.3 Hvilke hydrologiske processer og geologiske strukturelle forhold skal inddrages?.....	4-2
4.4 Fastlæggelse af hydrostratigrafiske enheder.....	4-2
4.5 Fastlæggelse af tidsperioder.....	4-3
4.6 Parameterfastlæggelse ud fra geologiske informationer og hydrologiske data.....	4-3
4.7 Skalerings effekter.....	4-4
4.8 Usikkerhed på konceptuel model.....	4-4
4.9 Referencer.....	4-5

Kapitel 5. Fra hydrogeologisk tolkningsmodel til numerisk grundvandsmodel.....	5-1
5.1 Valg af kode	5-1
5.2 Verifikation af kode.....	5-5
5.3 Præprocessering – overførsel af hydrogeologiske parametre til modellen.....	5-5
5.4 Beskrivelse af databehovet i forhold til valgte model og inkluderede procesbeskrivelser	5-9
5.5 Referencer.....	5-10
Kapitel 6. Fastlæggelse af randbetingelser	6-1
6.1 Randbetingelsestyper.....	6-1
6.2 Implementering af ydre randbetingelser.....	6-3
6.3 Implementering af indre randbetingelser (infiltration/grundvandsdannelse, vandløb, dræn søer/overfladisk afstrømning, oppumpninger).....	6-4
6.4 Referencer.....	6-6
Kapitel 7. Diskretisering af modelområdet i tid og sted.....	7-1
7.1 Diskretiseringstyper.....	7-1
7.2 Tidsskridt.....	7-3
7.3 Diskretiseringsfejl.....	7-5
7.4 Hvordan tester man sin diskretisering	7-6
7.5 Referencer.....	7-7
Kapitel 8. Processering af tidsseriedata.....	8-1
8.1 Nedbør, potentiel fordampning og temperatur	8-1
8.2 Arealanvendelse, jordtyper, jordfugtighed og aktuel fordampning	8-4
8.3 Vandindvinding	8-7
8.4 Trykniveau i form af tidsserier og potentialebilleder	8-7
8.5 Afstrømningsdata ved målestationer og synkronmålinger	8-8
8.6 Referencer.....	8-8
Kapitel 9. Startværdier, analyse af startværdiernes indflydelse på beregningsresultaterne.....	9-1
9.1 Hvilken betydning har startværdierne for stationære og ikke stationære simuleringer.....	9-1
9.2 Metoder til fastlæggelse af startværdier	9-2
9.3 Metoder til indkøring af “modellen”	9-2
9.4 Bestemmelse af startværdiernes indflydelse i den konkrete modelopsætning.....	9-2
9.5 Referencer.....	9-3
Kapitel 10. Kalibrering af strømningsmodel	10-1
10.1 Indledning.....	10-1
10.2 Observationsdata	10-3
10.3 Kalibreringskriterier	10-8
10.4 Kalibreringsparametre	10-11
10.5 Estimationsteknik	10-14
10.6 Præsentation af kalibreringsresultat.....	10-17
10.7 Referencer.....	10-21
Kapitel 11. Validering	11-1
11.1 Indledning.....	11-1
11.2 Definition af formål med validering.....	11-2
11.3 Forskellige typer af valideringstest.....	11-2
11.4 Praktiske aspekter i forbindelse med modelvalidering	11-3
11.5 Er kravene til modelvalidering urealistiske i praksis?.....	11-5
11.6 Referencer.....	11-6

Kapitel 12. Modellens repræsentativitet.....	12-1
12.1 Indledning.....	12-1
12.2 Modelantagelser	12-1
12.3 Modellens troværdighed	12-3
12.4 Modelanvendelse	12-4
12.5 Referencer.....	12-5
Kapitel 13. Anvendelse af modellen	13-1
13.1 Indledning	13-1
13.2 Grundvandsressourcevurdering og vandbalanceforhold	13-2
13.3 Afgrænsning af områder med opadrettede- eller nedadrettede gradienter	13-5
13.4 Grundvandsdannelse til øvre magasiner.....	13-5
13.5 Grundvandsdannelse til dybere magasiner	13-6
13.6 Grundvandsdannende oplande og indvindingsoplande til magasiner og/eller kildepladser/boringer	13-7
13.7 Transporttider og opholdstider i forskellige grundvandsmiljøer	13-9
13.8 Følsomheds- og usikkerhedsanalyser	13-9
13.10 Referencer.....	13-11
Kapitel 14. Rapportering af model og resultater.....	14-1
14.1 Indledning	14-1
14.2 Disposition for standardiseret modelrapport	14-2
14.3 Referencer.....	14-7
Kapitel 15. Vedligeholdelse, opdatering og udbygning af modeller. Forfining af model.	15-1
15.1 Kvalitetsdokument, modelrapport og digital kopi af færdige setupfiler mm. til modeldatabasen (fx cd ROM)	15-1
15.2 Modelarkiv. Hvilke grunddata og setupfiler bør man gemme digitalt, med henblik på en senere opdatering og udbygning af model?.....	15-2
15.3 Optimering og udbygning af geologisk model, konceptuel model og numerisk modelopsætning	15-2
15.4 Forfining af model (topografi, indre randbetingelser, arealdata, konceptuel model mm.)	15-3
15.5 Regional model – lokal model.....	15-3
15.6 Referencer.....	15-4
Kapitel 16. Modelprogrammer på markedet.....	16-1
16.1 Valg af de 3D modelkoder (motorer) og grafiske bruger interfaces (skaller) der indgår i sammenligningen	16-1
Kapitel 17. Kvalitetssikring i forbindelse med modelopgaver.....	17-1
17.1 Indledning	17-1
17.2 Mekanismer til at opnå bedre kvalitet i modellering	17-2
17.3 Omkostninger ved kvalitetssikring	17-3
17.4 Referencer.....	17-4
Appendiks A. Esbjerg modellen – et eksempel	A-1
A.1 Formålet med opstilling af model.....	A-1
A.2 Geologisk model.....	A-2
A.3 Konceptuel hydrogeologisk model	A-3
A.4 Valg af kode.....	A-6
A.5 Modelopsætning	A-7
A.6 Kalibrering af model.....	A-9
A.7 Simuleringer	A-13
A.8 Konklusion.....	A-19
A.9 Referencer.....	A-20

Appendiks B. Invers kalibrering af DK-model Sønderjylland.....	B-1
B.1 Indledning	B-1
B.2 Observationsdata.....	B-2
B.3 Kalibreringskriterier.....	B-5
B.4 Udvælgelse af kalibreringsparametre	B-6
B.5 Kalibreringsprocedure	B-8
B.6 Kalibreringsresultat.....	B-9
B.7 Konklusion.....	B-15
B.8 Referencer.....	B-16

Kapitel 0 INDLEDNING

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Grundvandsmodeller, formål, målgruppe, terminologi, modelcyklus, protokol

ABSTRACT: Grundvandsmodeller bruges i stigende omfang i amterne i forbindelse med detailkortlægning og zonerings. Modellering involverer flere forskellige parter med hver deres interesser og rolle, lige fra kodeudvikler, modelbruger til vandressourceforvalter. Der er behov for en betydelig opstramning i brugen af hydrologiske modeller med brug af en mere stringent terminologi samt mere opmærksomhed og systematik hos kodeudviklere, modelbrugere og vandressourceforvaltere. En forudsætning for at modeller kan anvendes optimalt er, at alle parter spiller deres rolle optimalt. Nærværende ståbi i grundvandsmodellering har medarbejdere i de amtslige vandressourceforvaltninger som primær målgruppe. Ståbien er tænkt som en tjekliste ved rekvirering og opstilling af grundvandsmodeller i forbindelse med zonerings. I dette indledende kapitel defineres en terminologi baseret på en idealiseret opfattelse af en modelcyklus baseret på fire grundlæggende elementer. Desuden opstilles en procedure for modelanvendelse med en opdeling i en række trin. Kapitlet afsluttes med en vurdering af situationen i Danmark i dag, når det gælder parter og rollefordeling, med fokus på et behov for bedre modelvalidering og dokumentation.

0.1 BAGGRUND OG FORMÅL

0.1.1 Baggrund

Numeriske grundvandsmodeller som beskriver strømning og stoftransport anvendes i stigende omfang som værktøjer, der kan medvirke til en bedre forståelse og dermed forvaltning af grundvandsressourcen. Grundvandsmodeller bruges således i et stigende omfang af amterne i forbindelse med detailkortlægning og zonerings, bl.a. til (a) overordnede regionale grundvandsmodeller (incl. overflademoduler), (b) detaljerede grundvandsmodeller dvs. strømningsmodeller og partikelbanemodeller og (c) vurdering af effekter af etablering af beskyttelseszoner (fx nitrat).

Numeriske modeller har begrænsninger i deres anvendelighed som følge af at de repræsenterer en forenkling af det virkelige fysiske system. Fokus i forskerkredse har i de seneste år i høj grad været rettet mod udvikling af forbedrede og mere brugervenlige modelkoder samt i studier af detailprocesser. Det har resulteret i en bedre forståelse af de grundlæggende processer og i bedre modelværktøjer. Det har imidlertid ikke i sig selv resulteret i forbedrede resultater i praktiske anvendelser. Hos vandressourceforvalterne (amter og vandværker) har der samtidig i stigende grad udviklet sig en praksis med (pris)konkurrence blandt rådgivere på mange af modelstudierne. Opmærksomheden på nødvendigheden af at dokumentere modelresultater, herunder at beskrive modelbegrænsninger og usikkerheder, er derimod ikke fulgt med i samme takt, hverken blandt forskere eller blandt brugerne. Resultatet har været en del frustrationer med modelstudier, som ikke svarede til forventningerne hos vandressourceforvalterne. Det er min opfattelse at nogle modelfolk 'oversælger', mens (bl.a. som en reaktion herpå) nogle vandressourceforvaltere stadig nærer en betydelig generel mistillid til modellers praktiske brugbarhed.

Samtidig eksisterer der en sand forvirring omkring anvendelse af begreber som model, modelsystem, kode, verifikation, validering, parametrisering, test, kalibrering, simulering mv. Denne

terminologiforvirring er ikke opstået i Danmark, men afspejler en intens diskussion og uenighed, der for tiden foregår i internationale videnskabelige kredse. Udover at denne forvirring ofte forstyrrer det praktiske modelarbejde på grund af misforståelser og manglende præcision i aftaler, kan det også ses som et symptom på, at der ikke er en fælles, sammenhængende, og konsistent opfattelse af hvad der er "god modelleringspraksis". Der er derfor behov for en betydelig opstramning i brugen af hydrologiske modeller med brug af en mere stringent terminologi samt mere opmærksomhed og stringens hos de involverede parter.

Modellering involverer flere forskellige parter med hver deres interesser og rolle. Forenklet kan nævnes kodeudviklere (ofte forskningsinstitutioner), modelbrugere (ofte rådgivere) og vandresourceforvaltere (ofte amter eller vandværker). En forudsætning for at modeller kan anvendes optimalt er, at alle parter spiller deres rolle optimalt, samt at samspillet fungerer efter klare retningslinier.

0.1.2 Formål og målgruppe

Nærværende ståbi i grundvandsmodellering har medarbejdere i de amtslige vandressourceforvaltninger som primær målgruppe. Ståbien er tænkt som en tjekliste ved rekvirering og opstilling af grundvandsmodeller i forbindelse med detailkortlægning og zonerings. Mere specifikt er formålene med ståbien derfor:

- At sætte medarbejderne i amterne i stand til at rekvirere og styre udarbejdelse af en grundvandsmodel hos en konsulent, dvs. at kunne stille de rigtige spørgsmål og kræve den nødvendige dokumentation.
- At indgå som kursusmateriale i et grundkursus i grundvandsmodellering i forbindelse med zonerings, som GEUS afholder.

Forudsætningen hos den personkreds, der skal benytte "ståbien", vil være kendskab til hydrogeologi generelt, men ikke nødvendigvis til numeriske grundvandsmodeller.

Ståbien skal belyse anvendelsen af grundvandsmodeller – med hvilket formål er det relevant at stille en grundvandsmodel op, og i hvor stor udstrækning kan en grundvandsmodel opfylde formålene eller besvare spørgsmålene.

0.2 TERMINOLOGI OG MODEL CYKLUS

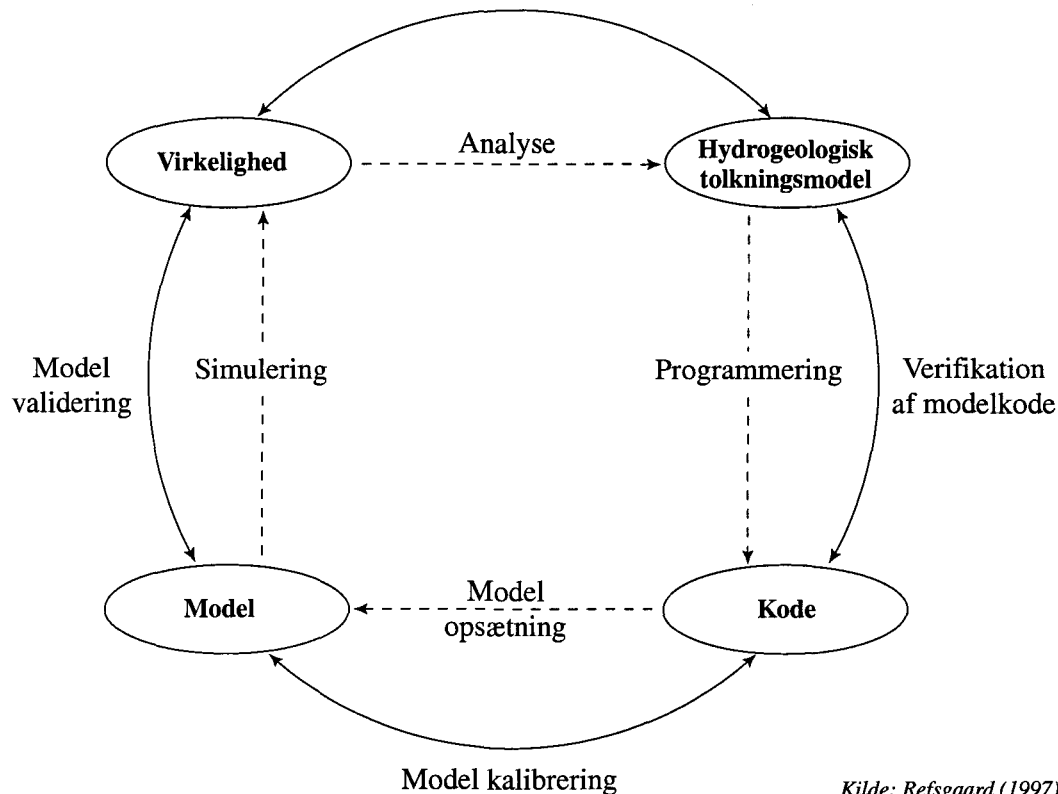
Definition af en terminologi vil uundgåelig afspejle en metodikopfattelse. Nærværende forslag til terminologi og metodik stammer ikke fra en enkelt, men fra en sammenstilling og modifikation af flere kilder: Schlesinger et al (1979), Anderson and Woessner (1992), Refsgaard (1996) og Henriksen (1997). Terminologien i tabel 0.1 er baseret på en idealiseret opfattelse af en modelcyklus som skitseret på figur 0.1, hvor simuleringssituationen opdeles i fire grundlæggende elementer. De indre pile beskriver processerne, som forbinder elementerne med hverandre, og de ydre pile henfører til de procedurer, som vurderer disse processers troværdighed.

Tabel 0.1 Definition af terminologi

<i>Fysiske system</i>	Det naturlige system, dvs. i dette tilfælde grundvandssystemet.
<i>Hydrogeologisk tolkningsmodel (= konceptuel model)</i>	En tolkning eller arbejdsbeskrivelse af karakteristika og dynamik i det fysiske system, dvs. en beskrivelse af hvilke processer, der forventes at indgå i beskrivelsen af virkeligheden, og hvilken indbyrdes vægt disse skal have (størrelsesordner kun). En hydrogeologisk tolkningsmodel er ofte baseret på en skematisk geologisk model med en hydrostratigrafisk beskrivelse af det givne område.
<i>Modelkode = modelsystem</i>	Et computer program, som uden ændringer i selve programmet kan benyttes til at opstille en numerisk model for et bestemt område. Eksempler på modelkoder er MODFLOW og MIKE SHE.
<i>Model</i>	En sted-specifik numerisk model indeholdende konkrete inputdata og modelparametre tilpasset et bestemt område.
<i>Opsætning af model</i>	Etablering af en sted-specifik model til den ønskede anvendelse inden for en acceptabel nøjagtighed.
<i>Simulering</i>	Modellens forenkede efterligning af det fysiske system. En simulering refererer i andre sammenhænge oftest til tidsvarierende beskrivelser. Her vil vi imidlertid benytte ordet simulering i forbindelse med både en stationær og en dynamisk modelkørsel.
<i>Kvalifikation af konceptuel model</i>	Et estimat over tilstrækkeligheden af en konceptuel model (hydrogeologisk tolkningsmodel) til den ønskede anvendelse indenfor en acceptabel nøjagtighed.
<i>Verifikation af modelkode</i>	Dokumentation for at en modelkode løser de givne ligninger med en specificeret nøjagtighed.
<i>Modelkalibrering</i>	Tilpasning af parameterverdier, så modellen kan reproducere givne feltdata inden for specificerede nøjagtighedsgrænser.
<i>Validering af model</i>	Dokumentation for at en sted-specifik model kan beskrive virkeligheden med en tilfredsstillende nøjagtighed.
<i>Nøjagtighedskriterium</i>	Et numerisk mål for overensstemmelsen mellem en modelsimulering og observerede feltdata. Benyttes som mål i kalibrerings- og valideringsprocedurer.
<i>Følsomhedsanalyse</i>	Analyse af simuleringens resultaters følsomhed overfor ændringer i kalibreringsparametre og andre modelantagelser, fx randbetingelser, hydrauliske parametre og tolkning af geologien. Ved en følsomhedsanalyse analyseres følsomheden overfor den enkelte usikkerhedskilder enkeltvis.
<i>Usikkerhedsanalyse</i>	Systematisk analyse af forskellige usikkerhedskilder (fx klimadata, hydrauliske parametre og geologiske tolkninger) og deres samlede indflydelse på usikkerheden af simuleringens resultater.
<i>Gyldighedsområde</i>	Det område for hvilket en given model er dokumenteret at have gyldighed

	indenfor givne nøjagtighedskriterier. Der kan defineres gyldighedsområder for både en konceptuel model, en modelkode og en sted-specifik model.
<i>Parameter</i>	En fysisk størrelse som forudsættes at være konstant i tid, fx hydraulisk ledningsevne eller magasinantal. Parametre beskriver et systems fysiske karakteristika.
<i>Variabel</i>	En fysisk størrelse som varierer i tid. Variable kan opdeles i input variable, som beskriver eksterne størrelser, og interne tilstandsvariable.
<i>Input variabel</i>	Input data som varierer i tid (tidsserier), fx data for klimaforhold eller op-pumpninger.
<i>Tilstandsvariabel</i>	Intern variabel, fx vandindhold i den umættede zone eller trykniveau i et givet punkt i en akvifer.
<i>Kildetekst til modelkode</i>	Computerprogrammets tekst/software kode hvor alle kommandoerne for beregningerne står skrevet. En kildetekst kan redigeres.
<i>Eksekverbar kode</i>	Fil indeholdende kildeteksten oversat til computersprog. Denne fil aktiveres for at køre programmet. En eksekverbar kode kan ikke redigeres.

Kvalificering af tolkningsmodel



Kilde: Refsgaard (1997)

Figur 0.1 Elementer i modelterminologi og deres indbyrdes sammenhænge

Hvor nogle af de udenlandske synspunkter, som f.eks. Konikow and Bredehoeft (1992) og Oreskes et al. (1994), er meget rigoristiske med fokus på fundamentale videnskabelige problemer, er grundlaget for nærværende forslag et ønske om at opstille en terminologi og et regelsæt, som kan bruges i praksis, og samtidig kan medvirke til en generel opstramning omkring modelanvendelse til glæde for alle involverede parter. Nedenstående terminologi og metodik opererer således med begreberne verifikation og validering (som anvendes rutinemæssigt af modelbrugere), men i snævrere og mere klart definerede betydninger end set hos mange andre forfattere.

Det er vigtigt at bemærke at nøjagtighedskriterier og gyldighedsområder, som i princippet skal opstilles for en konceptuel model, en modelkode og en sted-specifik model, er en integreret del af terminologien og modelcyklussen. Man kan således godt forestille sig, at f.eks. en grundvandsmodel for et givet område ikke vil passere de nødvendige valideringstest ved en specificeret nøjagtighed, og derfor må kategoriseres som ugyldig på dette nøjagtighedsniveau, mens den samme model for et mindre ambitiøst nøjagtighedskriterium vil være gyldig i visse geografiske områder og til visse formål.

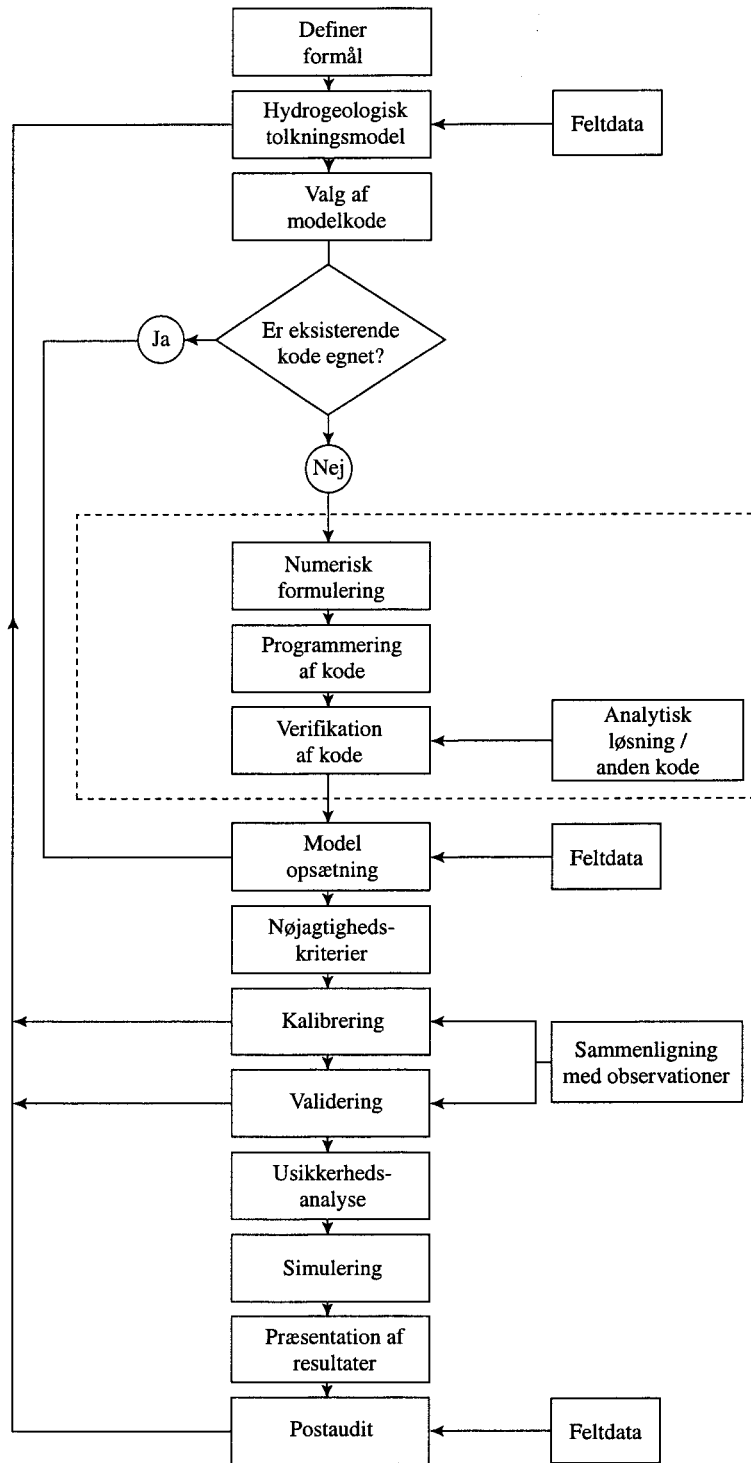
0.3 MODELPROTOKOL

Den følgende procedure for modelanvendelse er en modificeret udgave af den 'modelling protocol' som Anderson and Woessner (1992) foreslog. Proceduren er illustreret i figur 0.2 og beskrevet trin for trin i det følgende med referencer til de kapitler i nærværende ståbi, hvor emnet er nærmere beskrevet:

1. Det første trin er at *definere formålet* for modelanvendelsen. Et vigtigt element her er at give en første vurdering af den ønskede nøjagtighed af model output.
2. Herefter opstilles en *hydrogeologisk tolkningsmodel (konceptuel model)*, hvilket bl.a. omfatter en geologisk model samt en beskrivelse af hvilke processer der skal medtages i den efterfølgende numeriske model (f.eks. overfladevandsprocesser, makroporer, densitet, stoftransport, udveksling med vandløb) samt modelafgrænsning og randbetingelser. (Se ståbiens kapitler 3 og 4)
3. På baggrund af den konceptuelle model *udvælges* herefter en passende *modelkode*, som er dokumenteret gyldig (verificeret) til beskrivelse af den konceptuelle model. (Se ståbiens kapitel 5)
4. Hvis en passende modelkode ikke eksisterer kan det være nødvendigt at udvikle ny kode, som så skal *verificeres*. (Se ståbiens kapitel 4)
5. Efter at have valgt kode og indsamlet de nødvendige feltdata skal der foretages en *model opsætning*. Det indebærer valg af rumlig og tidlig diskretisering, definition af rand- og initialbetingelser samt et første gæt på parameterverdier ud fra feltdata. (Se ståbiens kapitler 5-9)
6. Herefter skal *nøjagtighedskriterierne*, som ønskes opfyldt i de efterfølgende kalibrerings- og valideringstrin, *fastlægges*. Ved fastsættelsen af disse kriterier skal der tages skyldig hensyn til den under trin 1 formulerede ønskede nøjagtighed og til de realistiske grænser, som de tilgængelige data stiller. Såfremt nøjagtighedskriteriet fastlægges som urealistisk højt, vil det enten være nødvendigt at modificere kriteriet eller at indsamle ekstra data. (Se ståbiens kapitel 10)
7. *Model kalibrering* involverer parameterjusteringer ved en sted-specifik model med det formål at reproducere virkeligheden inden for den givne nøjagtighedsramme. Modelkalibrering kan enten gennemføres manuelt (trial-and-error) eller ved hjælp af numeriske parameteroptimeringsalgoritmer (invers modellering). Det er under alle omstændigheder vigtigt at vurdere usikkerhederne i skønnet på modelparametrene f.eks. ved hjælp af følsomhedsanalyser. (Se ståbiens kapitel 10)
8. *Model validering* foretages ved at gennemføre test som dokumenterer at den givne model (med de kalibrerede parameterverdier) er i stand til at lave tilstrækkeligt nøjagtige forudsigelser til de ønskede formål. Dette kan indebære, at den kalibrerede model anvendes til forudsigelser på en anden periode og sammenlignes med feltdata, som ikke blev anvendt ved kalibreringen. De nødvendige testprocedurer diskuteres i ståbiens kapitel 11.
9. I tilknytning til modelvalideringen skal der foretages *usikkerhedsanalyser*, således at usikkerhederne på modelberegningerne kvantificeres og beskrives eksplicit. Som en konsekvens heraf kan

der nu drages konklusioner om modellens repræsentativitet og begrænsninger med hensyn til konkrete påtænkte modelanvendelser. (Dette er beskrevet i ståbiens kapitler 11 og 12).

10. *Model simulering* er ofte den afsluttende modelanvendelse. Set i lyset af de usikkerheder på modelparametre og måske usikkerhed om fremtidige forhold i oplandet (arealanvendelse, klimaforhold, mv.) bør der foretages følsomhedsanalyser for at få en fornemmelse af usikkerheden på modelforudsigelserne. (Se ståbiens kapitel 13)
11. *Resultaterne præsenteres* oftest i rapporter. (Se ståbiens kapitel 14). Men andre præsentationsformer såsom animationer og direkte overførsel af dedikerede modeller til slutbrugeren sker også hyppigt.
12. En ekstra mulighed for validering af en sted-specifik model er en såkaldt *postaudit* eller eftervalidering, som udføres flere år efter det egentlige modelstudie, når modellens forudsigelser kan vurderes mod nye feltdata. Amerikanske eksempler på postaudit indenfor grundvandsmodellering er beskrevet af Anderson and Woessner (1992). Et dansk eksempel findes i Suså området, hvor Suså modellen oprindelig var opstillet og kalibreret (men ikke valideret) for perioden 1951-80. Storstrøms Amt og Vestsjællands Amt rekvirerede en egentlig eftervalidering (DHI, 1988), på data fra perioden 1981-87. Postaudit sker i praksis ofte i forbindelse med opfølgende studier.



Kilde: Refsgaard

Fig. 0.2 Procedure for modelanvendelse (model protokol).

0.4 PARTER OG ROLLEFORDELING

0.4.1 De forskellige parters ansvar

Som beskrevet ovenfor er den nuværende situation med hensyn til modelvalidering og anvendelse ikke fuldt tilfredsstillende og kan, teoretisk set, let forbedres. Men som fremhævet af bl.a. Forkel (1996) kan den nuværende situation ikke forbedres blot ved en indsats af forskerne. Det kræver en indsats fra alle tre parter: kodeudviklere (typisk forskere), modelbrugere (typisk rådgivere) og vandressourceforvaltere (typisk amter og vandværker). De forskellige roller og ansvarsområder for de tre parter er vist i figur 0.3 med reference til de forskellige trin i modelproceduren gennemgået i afsnit 0.2 og figur 0.2.

Hovedansvaret for *vandressourceforvalteren* er at definere formål og fastsætte nøjagtighedskriterier for den efterfølgende modelanvendelse. Derudover er det forvalterens opgave at stille krav til kodeverifikation og modelvalidering. I mange rådgivningsstudier er nøjagtighedskriterier ikke specificerede overhovedet med det resultat at modelbrugeren, måske ubevidst, fastsætter dem i overensstemmelse med de opnåede modelresultater. I den sammenhæng er det vigtigt i udbudsmaterialet at sikre en konsistens mellem ambitionsniveauet (formål og nøjagtighedskriterier), de tilgængelige data og økonomi. Det kræver selvsagt en betydelig indsigt og en vis erfaring med brug af modeller hos forvalteren.

Modelbrugeren har ansvaret for udvælgelse af en passende kode (alternativt at godkende forvalterens valg) samt for model opsætning, kalibrering og validering. Specielt er modelbrugeren ansvarlig for at udarbejde valideringsdokumentation på en sådan måde, at gyldighedsområdet og den tilhørende nøjagtighed er velbeskrevet. Yderligere bør dokumentationen ideelt set gøres så grundig, at modelsimuleringerne om nødvendigt kan reproducere adskillige år senere. Modelbrugeren og forvalteren skal i fællesskab vurdere, hvad realistiske nøjagtigheder er. Desuden må modelbrugeren være klar over kodens begrænsninger og indgå i en dialog med kodeudvikleren omkring rapportering af brugererfaringer, mangler i dokumentation, kodefejl, markedsbehov mv.

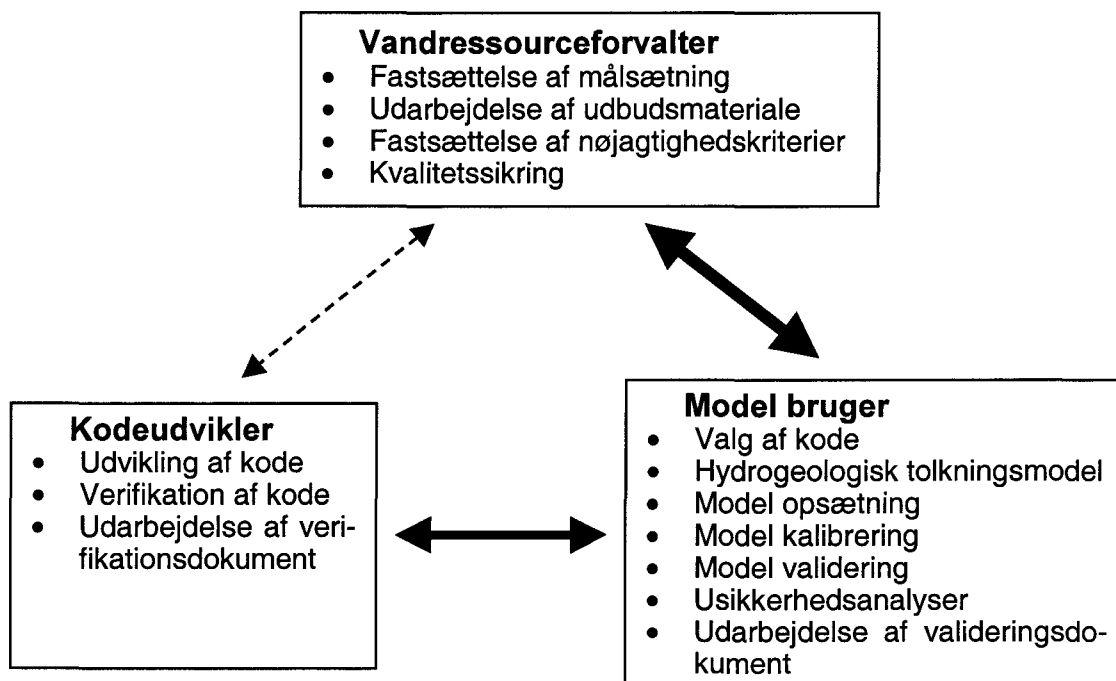


Fig. 0.3 Hovedansvarsområde og samspil mellem de forskellige parter til sikring af en optimal operationel brug af hydrologiske modeller.

Kodeudviklerens hovedansvarsområde er at udvikle og verificere koden. I denne sammenhæng er det vigtigt, at kodens begrænsninger fremgår af dokumentationen. Eftersom kodeudvikling er en kontinuert proces er kodevedligeholdelse og regelmæssige opdateringer med nye versioner vigtige. Selvom en modelkode bør have en omfattende dokumentation, vil der i praksis altid opstå tvivl en gang i mellem om en kodes funktion, selv for erfarne brugere. Derfor er en aktiv støtte til og dialog med modelbrugere altafgørende for at sikre en operationel modelanvendelse på et højt fagligt niveau.

Det er vigtigt at fremhæve, at de forskellige ansvarsområder, som de tre grupper i figur 0.3 har, er principielle, uafhængigt af hvorvidt de aktuelle personer i en konkret sammenhæng tilhører tre forskellige organisationer eller fungerer med forskellige roller i samme organisation.

Ovenstående betragtninger over ansvarsområder hos forskellige parter skal selvfølgelig ses i sammenhæng med den praktiske virkelighed, som i høj grad er styret af et samspil mellem udbud og efterspørgsel samt af betydelig konkurrence både mellem modelbrugere indbyrdes og mellem kodeudviklere indbyrdes. Dvs., hvis forvaltere ikke specificerer krav om en mere grundig og gennemskuelig modelvalidering med givne acceptable nøjagtighedsgrænser, så vil ingen rådgiver tilbyde det i et modelstudie, fordi det økonomisk/kontraktmæssigt er rarere at have lidt mere fri snor. Tilsvarende vil kodeudviklere ikke bruge mange ressourcer på at udarbejde verifikationsdokumentation, hvis det ikke er et markedskrav; i så fald vil ressourcerne måske blive brugt til at udvikle nye faciliteter i stedet.

0.4.2 Situationen i Danmark i dag

De foregående afsnit beskriver dels en vigtig problemstilling og dels nogle forslag til forbedrede procedurer, som vi alle i fællesskab burde have interesser i at arbejde henimod. Hvordan er situationen så i Danmark nu, og hvordan er den i sammenligning med situationerne i andre lande på disse områder ?

Der har aldrig været tradition for at lave stringent modelvalidering i Danmark. I ingen af de hidtidige større modelbaserede forskningsprojekter (Suså projektet, Karup projektet, Lossepladsprojektet, NPO projektet, SMP 1) har der været udført systematisk modelvalidering efter stringente procedurer. Tilsvarende er det undtagelsen i dag (hvis der overhovedet findes undtagelser ?), at amter og vandværker direkte forlanger, at en rådgiver laver stringent modelvalidering. I forbindelse med etableringen af den nationale vandressource model (Henriksen et al., 1997) er der dog lagt vægt på systematisk modelvalidering.

Baseret på egne og kollegaers erfaringer er det min opfattelse, at det faglige niveau blandt udviklere, rådgivere og amter/vandværker med hensyn til modellering generelt er højt i Danmark sammenlignet med andre lande. Men lige netop med hensyn til stringens omkring modelvalidering og dokumentation heraf er vi ikke i front.

Gennem de seneste 5-10 år er den praktiske brug af modeller steget voldsomt. I takt med mere brugervenlige modelkoder, mere erfarne brugere og en stor konkurrence blandt rådgiverne er der i denne periode sket en betydelig effektivisering, således at prisen for en 'standardopgave' er reduceret betydeligt. Derimod er det ikke givet, at kvaliteten af modelresultater også er steget (den bliver ofte ikke dokumenteret stringent). Modelvalidering koster selvfølgelig nogle ressourcer, men vil formentlig i de fleste tilfælde nemt tjene sig hjem i form af mere viden om pålideligheden af modelresultater.

0.5 REFERENCER

- Anderson, M.P. & Woessner, W.W. (1992) The role of postaudit in model validation. *Advances in Water Resources*, 15, 167-173.
- Forkel, C. (1996) Das numerische Modell - ein schmaler Grat zwischen vertrauenswürdigem Werkzeug und gefährlichem Spielzeug. Presented at the 26. IWASA, RWTH Aachen, 4-5 January 1996.
- Henriksen, H.J. (1997) Standard for kvalitetsdokumentation for anvendelse af grundvandsmodeller. ATV møde "Kalibrering, validering og usikkerheder på grundvandsmodeller", Schæffergården 28.05.97. ATV Komiteen vedrørende Grundvandsforening. 115-127.
- Henriksen, H.J., Knudby, C.J., Rasmussen, P & Nyegaard, P. (1997) Natioanl vandressource model. Modelopstilling og kalibrering for Fyn. Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelser, Rapport 1997/139.
- Konikow, L.F. & Bredehoeft, J.D. (1992) Ground-water models cannot be validated. *Advances in Water Resources*, 15, 75-83.
- Oreskes, N., Shrader-Frechette, K. & Belitz, K. (1994) Verification, validation and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science*, 264, 641-646
- Refsgaard, J.C. (1996) Terminology, modelling protocol and classification of hydrological model codes. In: *Abbott, M.B. and Refsgaard, J.C. (Eds): Distributed Hydrological Modelling*, 17-39, Kluwer Academic Publishers.
- Refsgaard, J.C. (1997) Kalibrering, validering – terminologi og metoder. ATV møde "Kalibrering, validering og usikkerheder på grundvandsmodeller", Schæffergården 28.05.97. ATV Komiteen vedrørende Grundvandsforening. 1-16.
- Refsgaard, J.C. & Storm, B. (1996) Construction, calibration and validation of hydrological models. In: *Abbott, M.B. and Refsgaard, J.C. (Eds): Distributed Hydrological Modelling*, 41-54, Kluwer Academic Publishers.
- Schlesinger, S., Crosbie, R.E., Gagné, R.E., Innis, G.S., Lalwani, C.S., Loch, J., Sylvester, J., Wright, R.D., Kheir, N. & Bartos, D. (1979) Terminology for model credibility. SCS Technical Committee on Model Credibility. *Simulation*, 32(3), 103-104.

Kapitel 1 MATEMATISK OG NUMERISK GRUNDLAG FOR GRUNDEVANDSMODELLERING

Karsten Høgh Jensen

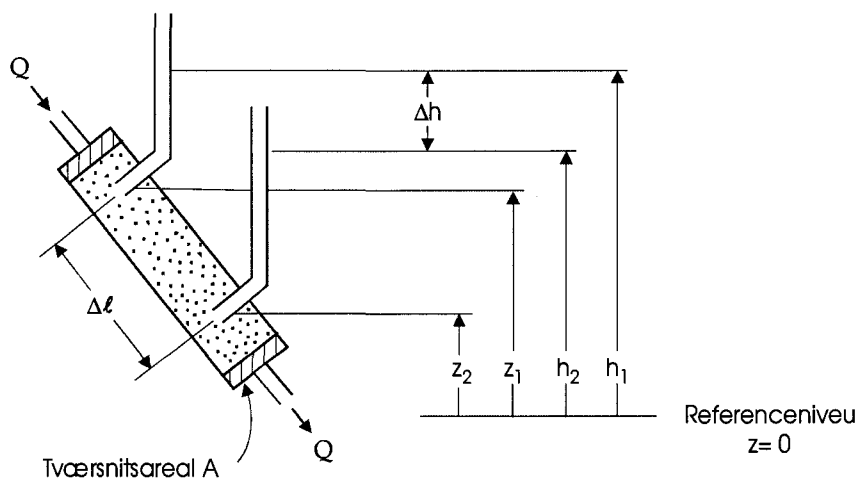
Institut for Strømningsmekanik og Vandressourcer (ISVA), DTU

Nøglebegreber: Darcy's lov, kontinuitetsligning, styrende differentialligning, numerisk diskretiseringsmetoder, løsning af ligningssystemer

ABSTRACT: Den styrende differentialligning for grundvandsstrømninger udledes ved at kombinere strømningsligningen (Darcy's lov) med massebevarelseligningen. En numerisk approksimation til denne ligning involverer en diskretisering både i steds- og tidsdomænet. I de fleste grundvandsmodeller anvendes "finite difference" metoden. Der gives en introduktion til de generelle principper bag denne metode. For eksplicite formuleringer fås en meget simpel løsning, men til gengæld er der restriktioner på tidsskridtet. Implicitte formuleringer fører et mere kompliceret system af koblede lineære ligninger, som skal løses ved hjælp af matrixløserne. Til gengæld er der ikke de samme begrænsninger på tidsskridtet.

1.1 TRE-DIMENSIONALE STRØMNINGSLIGNING

Det matematiske grundlag for kvantitative beskrivelser af strømninger i porøse medier og herunder grundvandsstrømninger er Darcy's lov, som blev fremsat af den franske ingeniør Darcy i 1856. Udgangspunktet for udviklingen af denne lovmæssighed var en række meget simple forsøg udført i en cylinder af tværsnitsareal A fyldt med sand. For forskellige vandføringer Q (m^3/s) gennem cylinderen målt det hydrauliske trykniveau (potentialet) ved hjælp af to manometre placeret i højden z_1 og z_2 (m) over et referenceniveau $z=0$. Afstanden mellem manometrene langs rørets længdeakse er Δl (m) og højden af vandstanden i de to manometerrør er henholdsvis h_1 og h_2 (m), jvnf. figur 1.



Figur 1. Eksperimentel opstilling til illustration af Darcy's lov

Filterhastigheden eller Darcy hastigheden q (m/s) defineres som vandføringen divideret med det gennemstrømmede tværsnitsareal A (m²):

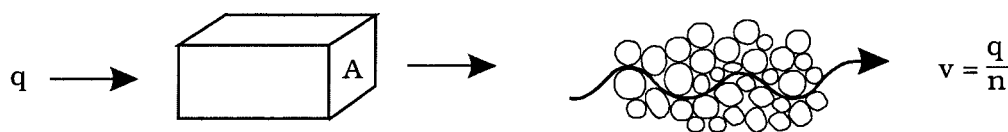
$$q = \frac{Q}{A} \quad (1.1)$$

Denne volumenflux er en fiktiv hastighed, som repræsenterer vandstrømningen over hele tværsnittet inklusive kornene. Filterhastigheden repræsenterer en makroskopisk størrelse af relevans for vandstrømninger, og den er let at måle. Imidlertid må den ikke forveksles med den mikroskopiske porevandshastighed v mellem de enkelte korn, som er af relevans for transport af opløste stoffer, men som til gengæld ikke kan måles direkte.

Porevandshastigheden v (m/s) udregnes om:

$$v = \frac{q}{n} \quad (1.2)$$

hvor n er porøsiteten. Forskellen mellem de to hastighedsbegreber er illustreret i figur 2.



Figur 2. Illustration af Darcy hastighed og porevandshastighed

Darcy's forsøg (figur 1) viste, at filterhastigheden q er proportional med forskellen i hydraulisk trykniveau h_1-h_2 og omvendt proportional med afstanden mellem manometerudtagene l målt langs røret. Indføres $\Delta h=h_2-h_1$ fås at $q \sim -\Delta h$ og $q \sim -1/\Delta l$. Indføres en proportionalitetskonstant K kan Darcy's lov skrives som:

$$q = -K \frac{\Delta h}{\Delta l} \quad (1.3)$$

hvor $\Delta h/\Delta l$ er gradienten i hydraulisk trykniveau og konstanten K den hydrauliske ledningsevne (m/s). Formuleret på differentiell form ser ligningen således ud:

$$q = -K \frac{dh}{dl} \quad (1.4)$$

Denne lovmæssighed angiver altså, at der er en lineær sammenhæng mellem vandfluxen og gradienten i det hydrauliske trykniveau med en proportionalitetskonstant K , som er en parameter, der afhænger både af det porøse mediums materialegenskaber og den strømmende væskes egenskaber. En parameter, som kun karakteriserer det porøse medium er permeabiliteten k (m²), og mellem disse to parametre er der følgende sammenhæng:

$$K = \frac{k \rho g}{\mu} \quad (1.5)$$

hvor ρ er vandets densitet (kg/m^3), μ er viskositeten (kg/ms) og g er tyngdeaccelerationen (m/s^2). De to parametre anvendes i flæng, og ofte anvendes betegnelsen permeabilitet, hvor der i virkeligheden menes hydraulisk ledningsevne.

Darcy's ligning forudsætter at der forekommer laminar strømning, hvilket sædvanligvis er tilfældet i praksis. Opskrevet for rene grundvandsstrømninger som anført i ligning (1.4) er der tale om en meget simpel lineær ligning, som sædvanligvis ikke giver anledning til de store løsningsmæssige problemer. Løsningen af Darcy's ligning er i overvejende grad kompliceret af den meget store naturlige variation, der forekommer dels indenfor de samme sedimenttyper og selvfølgelig ikke mindst imellem de forskellige aflejringer. Den rumlige variation i den hydrauliske ledningsevne er særdeles vanskelig at kortlægge og kvantificere.

Darcy's ligning kan generaliseres til både to og tre dimensioner, og i stedet for at beskrive strømning i forhold til en koordinat langs strømningsretningen, er det mere hensigtsmæssigt at relatere beskrivelsen til et indlagt koordinatsystem. Antages x og y akserne placeret i horisontalplanet og z akse vinkelret herpå, kan den tre-dimensionale version af Darcy's lov i den mest simple form opskrives som:

$$\begin{aligned} q_x &= -K_x \frac{\partial h}{\partial x} \\ q_y &= -K_y \frac{\partial h}{\partial y} \\ q_z &= -K_z \frac{\partial h}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.6)$$

hvor K_x , K_y og K_z repræsenterer de hydrauliske ledningsevner i x , y og z retningerne. Da h nu er en funktion af x , y og z er de stedlige afledede nu anført som partiel differentiation. Som opskrevet ovenfor kræves, at koordinataksene er orienteret langs de principale retninger for den geologiske anisotropi. Selv om det måske ikke altid er tilfældet i praksis, vil en mere komplet form af ligning (1.6) involvere flere komponenter af den hydrauliske ledningsevne, som det vil være vanskeligt (umuligt) at kvantificere i praksis. Tre-dimensionale beregninger forenkles ofte yderligere under antagelse af, at der er tale om den samme parameterværdi i horisontalplanet, dvs. $K_x=K_y$, hvilket betyder, at der "kun" skal parameterfastsættes en værdi for henholdsvis de horisontale og vertikale strømninger.

For at løse et strømningssproblem skal strømningssligningen (dvs. Darcy's lov) kombineres med massebevarelsesligningen eller kontinuitetsligningen. I den forbindelse er det specifikke magasin S_s for grundvandsmagasinet en relevant parameter. Det specifikke magasin defineres som den vandmængde 1 m^3 af grundvandsmagasinet kan frigive ved en sænkning i det hydrauliske trykniveau på 1 m . Denne vandfrigivelse skyldes dels en elastisk sammentrykning af kornskelettet og dels en udvidelse af vandet. Det specifikke magasin S_s (m^{-1}) kan udregnes som:

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta) \quad (1.7)$$

hvor α og β repræsenterer henholdsvis kornskelettets og vandets kompressibilitet, hvor førstnævnte mekanisme sædvanligvis er klart den dominerende.

Herefter kan massebevarelsesligningen opstilles. Denne ligning udtrykker, at netto tilstrømningen til et enhedsvolumen i grundvandsmagasinet skal modsvares af en tilsvarende opmagasinering.

Antages at både de stedslige og tidslige ændringer i vandets densitet er negligeable kan bevarelsesligningen eller med disse antagelser kontinuitetsligningen udtrykkes som:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} - Q_p + R \quad (1.8)$$

hvor Q_p angiver fjernet vand (f.eks. ved oppumpning) og R angiver tilført vand (f.eks. som nedsivning). Kombineres strømningsligningen (1.6) og kontinuitetsligningen (1.8) fås den styrende partielle differentiaalligning for 3-D grundvandsstrømninger:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) - Q_p + R \quad (1.9)$$

Denne ligning er det matematiske grundlag for beskrivelse af tre-dimensionale grundvandsstrømninger.

1.2 TO-DIMENSIONALE STRØMNINGSLIGNING

For regionale grundvandsstrømninger er de vertikale strømningshastigheder ofte meget mindre end de horisontale ($q_z \ll q_x, q_y$), hvilket betyder, at der approksimativt kan antages hydrostatisk trykfordeling over grundvandsmagasinet dybde. For artesiske grundvandsmagasiner med tidsinvariant lagtykkelse kan den tredje dimension elimineres ved at foretage en integration over dybden, således at den samlede horisontale strømning og lagtykkelsens samlede magasineringskapacitet beregnes.

To nye parametre defineres, transmissiviteten T (m^2/s)

$$T = \int_0^d K(z) dz \quad (1.10)$$

hvor d er dybden af grundvandsmagasinet, og magasintallet S (-)

$$S = \int_0^d S_s dz \quad (1.11)$$

Hvis der er tale om homogene magasiner udregnes de to parametre simpelt som

$$T = Kd \quad (1.12)$$

og

$$S = S_s d \quad (1.13)$$

Den vertikalt integrerede version af strømningsligning (1.9) for to-dimensionale strømninger i artesiske grundvandsmagasiner har følgende udseende:

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) - Q_p + R \quad (1.14)$$

hvor T_x og T_y repræsenterer transmissiviteterne i henholdsvis x- og y-aksens retning.

For frie grundvandsmagasiner, hvor den øvre afgrænsning udgøres af grundvandsspejlet (defineret som det niveau, hvor vandtrykket svarer til atmosfæretrykket), kan der under antagelse af, at der er hydrostatisk trykfordeling i et vertikalsnit, ligeledes udledes en styrende differentiaalligning for horisontale strømninger:

$$S_y \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (K_x h \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_y h \frac{\partial h}{\partial y}) - Q_p + R \quad (1.15)$$

Denne ligning betegnes Boussinesq' ligning og er her opskrevet under antagelse af, at referenceniveauet udgøres af magasinets nedre begrænsning, således at magasinets samlede ledningsevne er K_h . Dette svarer til en tidsvarierende transmissivitet, som betyder, at der er tale om en ikke-lineær ligning. Parameteren S_y betegnes specifik ydelse, og den repræsenterer den vandmængde, som frigives, når grundvandsspejlet sænkes 1 m. Vandfrigivelsen fra et frit magasin er meget større end fra et artesisk magasin, fordi der i førstnævnte tilfælde er tale om en afdræning af porevoluminet, mens frigørelsen i artesisk magasin som tidligere beskrevet skyldes kornskelettets og vandets sammentrykkelighed. I tilfælde af, at fluktuationerne i grundvandsspejlet er små i forhold til magasinets vertikale udstrækning, kan K_h tilnærmelsesvist regnes som en konstant størrelse, Boussinesq' ligning er dermed enslydende med strømningsligningen for artesiske grundvandsmagasiner. Ligning (1.14) er inkluderet i alle to-dimensionale numeriske grundvandsmodeller, og i de fleste modeller er det desuden muligt at foretage beregninger på grundlag af ligning (1.15). For ikke-stationære beregninger er det nødvendigt at angive en værdi for magasintallet, hvorimod stationære løsninger i de fleste modeller opnås ved at sætte magasintallet til 0.

1.3 FORUDSÆTNINGER FOR LØSNING AF PARTIELLE DIFFERENTIALLIGNINGER

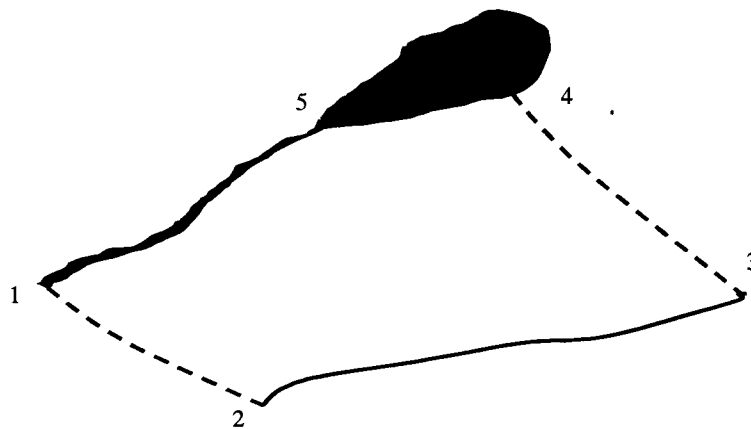
For at forenkle diskussionen af de generelle principper for diskretisering og løsning af de partielle differentiaalligninger for grundvandsstrømninger vil den følgende beskrivelse tage udgangspunkt i de to-dimensionale strømningsligninger. Principperne kan imidlertid generaliseres til tre dimensioner.

For at løse strømningsligningen enten analytisk eller numerisk skal følges specificeres:

1. Initialbetingelser for modelområdet (hydraulisk trykniveau). Initialbetingelser er kun relevante for ikke-stationære strømningsproblemer.
2. Fjernelse eller tilførsel af vand indeni modelområdet (oppumpning, nedsivning)
3. Randbetingelser langs hele modelranden. Der er tre mulige randbetingelser:
 - (i) type 1 (Dirichlet betingelse): specificeret hydraulisk trykniveau
 - (ii) type 2 (Neumann betingelse): specificeret flux. Som et meget anvendt specialtilfælde for denne type randbetingelse kan nævnes en 0-flux randbetingelse, som kan anvendes i forbindelse med en impermeabel barriere, et grundvandsskel eller en strømlinie

- (iii) type 3 (Cauchy betingelse): trykniveaafhængig flux randbetingelse. Denne randbetingelse optræder, når der sker vandudveksling gennem semipermeable lag, f.eks. bundsedimenter i vandløb eller lagfølger (aquitard) til tilgrænsende grundvandsmagasiner. Vandfluxen vil være proportional med forskellen mellem trykniveauet i det betragtede grundvandsmagasin og trykniveauet i enten vandløbet eller det tilgrænsende magasin.

I figur 3 er vist et eksempel på anvendelse af de forskellige typer af randbetingelser:



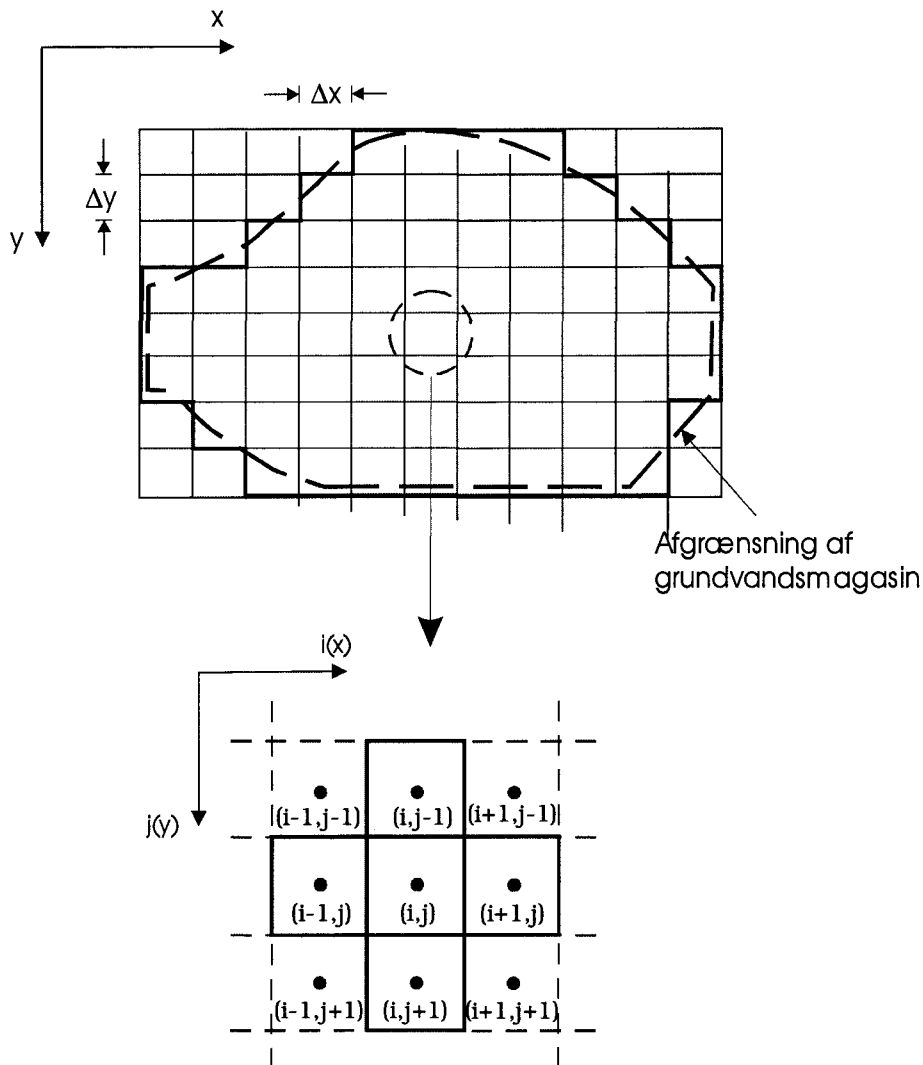
Figur 3. Illustration af forskellige typer randbetingelser for en planmodel af et grundvandsmagasin

- 1-2: strømlinie (type 2: 0-flux)
- 2-3: grundvandsskel (type 2: 0-flux)
- 3-4: strømlinie (type 2: 0-flux)
- 4-5: sø (type 1: specificeret trykniveau)
- 5-1: vandløb (type 3)

1.4 NUMERISKE DISKRETISERING

De klassiske metoder til diskretisering af differentiaalligninger er "finite difference" og "finite element" metoderne, hvor førstnævnte er den mest udbredte indenfor grundvandsmodellering. Begge metoder indebærer, at den partielle differentiaalligning erstattes af et sæt af differensligninger baseret på en diskretisering i sted og tid. Metoderne rummer hver deres fordele og ulemper. "Finite element" metoden bl.a. den fordel, at der kan foretages en meget fleksibel stedslig diskretisering. I de mindre interessante dele af modelområdet kan der anvendes en grov diskretisering, som så gradvist kan forfines i de områder, hvor der forekommer større gradienter i det hydrauliske trykniveau, f.eks. nær indvindingsboringer eller vandløb. Til gengæld er metoden konceptuelt mere kompliceret og kræver en større programmeringsmæssig indsats. Desuden kan definitionen og opstillingen af det numeriske net være mere besværligt. "Finite difference" metoden er konceptuelt noget enklere, og det er derfor den metode, som vil danne grundlag for den efterfølgende introduktion til numeriske metoder.

Enhver anvendelse af en numerisk grundvandsmodel indebærer, at der skal foretages en diskretisering af grundvandsmagasinet ved at foretage en opdeling i et antal beregningselementer som illustreret i figur 4.



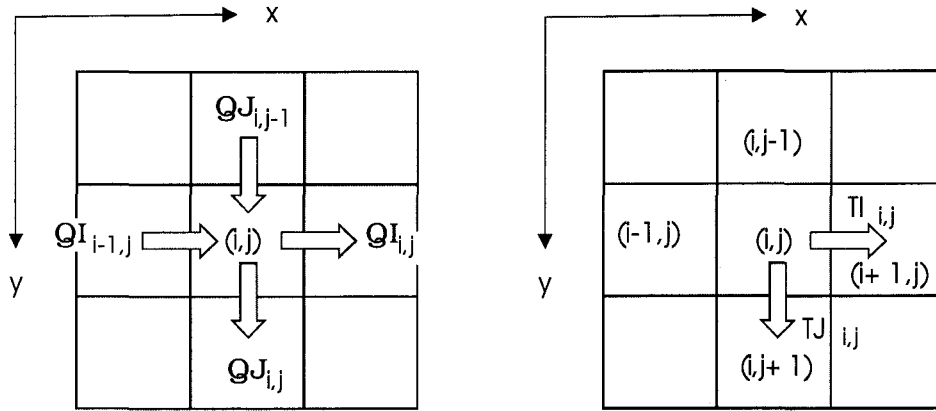
Figur 4. Diskretisering af et grundvandsmagasin med kvadratiske elementer

I x-aksens retning benyttes index i og i y-retningen index j , således at et bestemt element er karakteriseret ved koordinaten (i,j) . Antallet elementer i de to retninger betegnes ved N_X og N_Y . Det er indlysende, at for en finere diskretisering Δx og Δy opnås en mere nøjagtig og detaljeret beskrivelse af strømningsforholdene. Som det også fremgår af figuren, vil en finere diskretisering give en bedre opløsning af afgrænsningen af magasinet. Tilsvarende diskretiseringen i stedet foretages også en opdeling af tidsdomænet i et antal trin t_0, t_1, t_2, \dots . Tidstrinet Δt kan varieres afhængig af hvor hurtigt trykændinger forplanter sig.

For at udvikle den diskretiserede form af den styrende differentiaalligning foretages sædvanligvis en Taylor udvikling, hvorved differensligningen og de tilhørende trunkeringsled fremkommer. I det følgende anvendes en mere simpel og gennemskuelig metode, som består i at opstille de

diskretiserede versioner af Darcy's lov og kontinuitetsligningen for hver enkelt celle, Kinzelbach (1986).

Vi betragter en udvalgt celle (i,j) og dens fire naboceller, og det antages er der kun sker strømning mellem centercellen og de fire naboceller, figur 5. Figuren angiver den fortegns- og notationskonventionen, som anvendes for strømningen og transmissiviteten mellem nabo celler.



Figur 5. Fortegns- og notationskonvention for vandsfluxe og transmissiviteter .

QI og QJ repræsenterer vandfluxen mellem to beregningspunkter i henholdsvis x- og y-aksens retninger, og TI og TJ angiver på tilsvarende måde gennemsnitlige eller repræsentative transmissivitetsværdier mellem beregningspunkterne.

Først opstilles vandbalancen for centercellen (i,j) for tidsintervallet Δt , idet det antages, at Δt er så kort, at strømningerne mellem cellerne kan udtrykkes ved et repræsentativt trykniveau for dette tidsinterval. Idet der er tale om fire horisontale strømning bidrag samt bidrag for oppumpning (Q) og nedsivning (R), kan der opstilles følgende vandbalance:

$$(h_{i,j}(t + \Delta t) - h_{i,j}(t))S_{i,j}\Delta x\Delta y = (QI_{i-1,j} + QJ_{i,j-1} - QI_{i,j} - QJ_{i,j} - Q + R)\Delta t \quad (1.16)$$

De fire horisontale vandfluxe kan formuleres på diskret form som:

$$\begin{aligned} QI_{i-1,j} &= \Delta y TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta x} \\ QJ_{i,j-1} &= \Delta x TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta y} \\ QI_{i,j} &= \Delta y TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i+1,j}(t')}{\Delta x} \\ QJ_{i,j} &= \Delta x TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i,j+1}(t')}{\Delta y} \end{aligned} \quad (1.17)$$

Det er her antaget, at den vandstrømning, der sker indenfor tidsskridtet Δt kan beskrives ved en værdi for det hydrauliske trykniveau til et tidspunkt t' i intervallet $\{t; t+\Delta t\}$.

Når transmissiviteten varierer fra celle til celle melder spørgsmålet sig, hvorledes de repræsentative værdier TI og TJ for strømningen mellem cellerne udregnes ud fra værdierne for cellerne. Sædvanligvis anvendes enten et aritmetrisk gennemsnit

$$TI_{i,j} = \frac{T_{i,j} + T_{i+1,j}}{2} \quad (1.18)$$

eller et harmonisk gennemsnit

$$TI_{i,j} = \frac{2T_{i,j}T_{i+1,j}}{T_{i,j} + T_{i+1,j}} \quad (1.19)$$

Det harmoniske gennemsnit svarer til en seriemodstand, hvilket er i overensstemmelse med, at vandet først skal strømme gennem et område med en transmissivitsværdi og dernæst et område med en anden værdi. Teoretisk er denne gennemsnitsdannelse derfor at foretrække, og yderligere rummer den fordele, når der skal inkorporeres 0-flux randbetingelser.

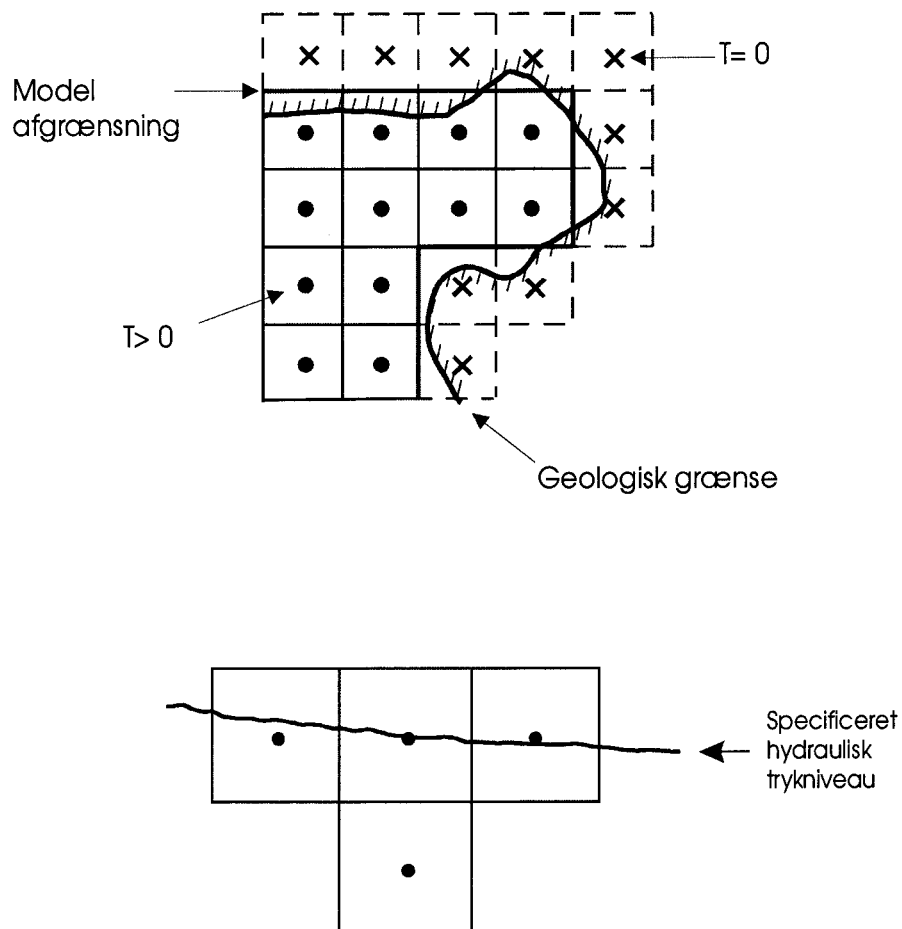
Kombineres strømningstiligningerne for de fire vandudvekslinger med nabocellerne ligning (1.17) med kontinuitetsligningen ligning (1.16) fås følgende ligning:

$$S_{i,j} \frac{(h_{i,j}(t + \Delta t) - h_{i,j}(t))}{\Delta t} = TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta x^2} + TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta y^2} - TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i+1,j}(t')}{\Delta x^2} - TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i,j+1}(t')}{\Delta y^2} - Q + R \quad (1.20)$$

En sådan differensligning kan opskrives for alle celler i modelområdet, hvilket fører til i alt $NX \cdot NY$ ligninger. I disse ligninger skal der indbygges information om modelområdet og randbetingelserne. For de celler, som ligger uden for modelområdet og derfor ikke skal medtages i beregningerne, sættes transmissiviteten til $T=0$. 0-flux randbetingelsen, som optræder hyppigt i grundvandsmodellering (impermeable grænser, grundvandsskel og strømmlinier), indbygges meget enkelt, når der anvendes et harmonisk gennemsnit af transmissiviteten mellem beregningspunkterne, ligning (1.19). Når transmissiviteten ved en impermeabel grænse angives til 0, vil denne gennemsnitsdannelse føre til, at der ikke vil strømme vand på tværs af grænsen, jvnf. figur 6. Flux betingelser med værdier forskellig fra 0 indbygges i modellen via Q og R leddene i ligning (1.20). Ved specificerede hydrauliske trykniveauer udlades differensligningen for denne celle af beregningerne og erstattes med de angivne værdier

$$h_{i,j} = f(t) \quad (1.21)$$

jvnf. figur 6.



Figur 6. Indbygning af randbetingelser i den numeriske formulering

1.5 FORMULERING OG LØSNING AF DIFFERENSLIGNINGER

Når randbetingelserne er indbygget i ligningerne er næste trin at løse det sammenhørende sæt af $NX \cdot NY$ differensligninger. Før dette kan ske skal værdien for t' i ligning (1.20) imidlertid specificeres, og valget af denne værdi har afgørende indflydelse på løsningsmetoden. Diskussionen af de forskellige metoder kan tage udgangspunkt i følgende ligning, hvor den værdi for $h(t')$, som indgår i ligning (1.17) til beregning af Darcy fluxen, udregnes som et vægtet gennemsnit af $h(t)$ og $h(t+\Delta t)$:

$$h_{i,j}(t') = (1 - \theta)h_{i,j}(t) + \theta h_{i,j}(t + \Delta t) \quad (1.22)$$

hvor θ kan antage værdier mellem 0 og 1. For $\theta=0$ kan trykniveauerne til det nye tidsskridt udtrykkes eksplicit som funktion af trykniveauerne for det gamle tidsskridt (heraf navnet eksplicitte

metode), hvorimod $\theta=1$ resulterer i en formulering, hvor trykniveauerne til det nye tidsskridt indgår implicit i formuleringen (heraf navnet implicitte metode). For $\theta=0.5$ fås den såkaldte Crank-Nicholson formulering, som er et gennemsnit af de eksplicitte og implicitte formuleringer. I det følgende vil kun den eksplicitte og implicitte metode blive beskrevet.

Eksplicit metode

For $\theta=0$ fås den eksplicitte formulering svarende til at $t'=t$. Introduceres denne værdi i ligning (1.20) fås følgende differensligning:

$$h_{i,j}(t + \Delta t) = h_{i,j}(t) + \frac{\Delta t}{S_{i,j}} \left(TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t) - h_{i,j}(t)}{\Delta x^2} + TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t) - h_{i,j}(t)}{\Delta y^2} - TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t) - h_{i+1,j}(t)}{\Delta x^2} - TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t) - h_{i,j+1}(t)}{\Delta y^2} - Q + R \right) \quad (1.23)$$

hvor $i=1, 2, 3 \dots NX$ og $j=1, 2, 3, \dots NY$. Som det fremgår af ligningen er trykniveauet til det næste diskrete tidspunkt udtrykt eksplicit som funktion af det kendte trykniveau for det foregående tidsskridt. Beregningsgangen foregår derfor simpelt ved, at ligningerne for alle beregningspunkter for hvert tidsskridt opdateres og trykniveauet til det nye tidspunkt udregnes, som herefter indgår som beregningsgrundlag for det næste tidsskridt. Herved kan simuleringen udføres fra starttidspunkt til et specificeret sluttidspunkt.

Den eksplicitte løsningsmetode er meget simpel at programmere, men den har imidlertid den ulempe, at der skal anvendes små Δt for at undgå, at løsningen bliver ustabil. For at sikre stabilitet skal følgende numeriske kriterium være opfyldt:

$$\frac{T}{S} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) \leq \frac{1}{2} \quad (1.24)$$

for samtlige beregningspunkter. Det fører ofte til meget små værdier for Δt , som giver urealistiske beregningstider, hvis der er tale om store modelområder og simuleringer for mange år.

Implicit løsning

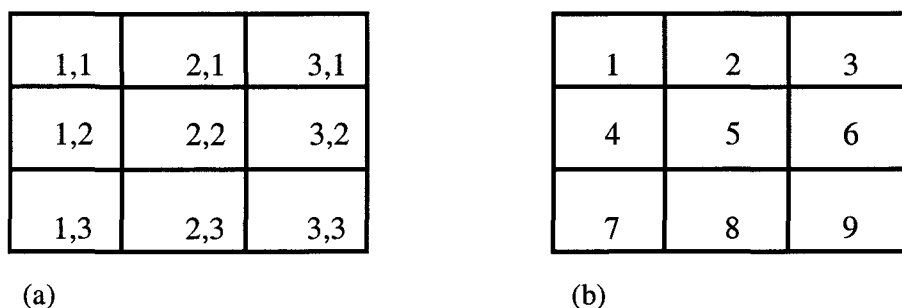
Hvis $\theta=1$ fås følgende formulering af differensligningen (1.20):

$$\begin{aligned} & h_{i-1,j}(t + \Delta t) \frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} + h_{i,j-1}(t + \Delta t) \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \\ & h_{i,j}(t + \Delta t) \left(-\frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} - \frac{S_{i,j}}{\Delta t} \right) + \\ & h_{i+1,j}(t + \Delta t) \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} + h_{i,j+1}(t + \Delta t) \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} = -Q + R - S_{i,j} h_{i,j}(t) \Delta t \end{aligned} \quad (1.25)$$

hvor $i=1, 2, 3 \dots NX$ og $j=1, 2, 3 \dots NY$. Som det fremgår af denne differensligning er trykniveauet $h_{i,j}(t+\Delta t)$ ikke længere udtrykt eksplicit som funktion af informationer fra det

foregående tidsskridt, men i ligningen optræder tillige de ukendte trykniveauer til det nye tidspunkt for nabocellerne, heraf navnet "implicit". Der er nu tale om et system af koblede lineære differensligninger.

Lad os som eksempel betragte et meget simpel system bestående af 3x3 beregningspunkter, figur 7.



Figur 7. Grundvandsmodel på 3x3 numeriske celler.

For ovennævnte simple system er der tale om at beregne trykniveauet for 9 celler. I stedet for at referere til en celle ved koordinaterne (i,j) (figur 7a) indføres en mere simpel indeksering, hvor hver celle tildeles et nummer, som starter i øverste venstre hjørne og derefter gennemløber cellerne rækkevis i alt N=NX*NY beregningsceller (figur 7b). Med denne notation kan ligning (1.25) opskrives på følgende måde

$$\sum_{l=1}^N a_{kl} h_l(t + \Delta t) = b_k \quad (k = 1, \dots, N) \quad (1.26)$$

hvor a_{kl} er en NxN matrix og b er en vektor med kendte størrelser. En mere kompakt måde at skrive dette ligningssystem på er

$$[A]\{h\} = \{b\} \quad (1.27)$$

Elementerne i denne matrice udregnes som

$$\begin{aligned} a_{kk} &= -\frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} - \frac{S_{i,j}}{\Delta t} \\ a_{k,k+1} &= \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} & a_{k,k-1} &= \frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} \\ a_{k,k-NX} &= \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} & a_{k,k+NX} &= \frac{TJ_{i,j+1}}{\Delta y^2} \end{aligned} \quad (1.28)$$

For en 3x3 model har matricen følgende udseende

$$\begin{pmatrix}
 x & x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 x & x & x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\
 x & 0 & 0 & x & x & 0 & x & 0 & 0 \\
 0 & x & 0 & x & x & x & 0 & x & 0 \\
 0 & 0 & x & 0 & x & x & 0 & 0 & x \\
 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & x & x & x \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & x & x
 \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

'x' angiver et element forskellig fra 0. Det fremgår af ligning (1.29) at mange af elementerne i matricen er 0. Det bemærkes dog, at alle diagonalelementerne er forskellig fra 0.

Dette ligningssystem skal løses ved hjælp af matrix løsere. Implicitte metoder fører til en mere kompliceret opbygning af model koden, men fordelene er, at der ikke længere er begrænsninger på tidsskridtet.

Løsning af matricer er en matematisk disciplin i sig selv, og de forskellige numeriske modeller anvender forskellige metoder. I de senere år har der været en stigende interesse for at simulere stadig mere komplekse og større systemer i tre dimensioner, hvilket har stimuleret en udvikling af mere robuste og effektive matrixløsere. Traditionelt er matrix ligninger blevet løst ved hjælp af *direkte metoder* så som Gauss elimination og den såkaldte LU dekomposition. Selv om disse metoder kan udnytte, at matricen har en båndstruktur, er de beregningstunge og pladskrævende og i realiteten ikke anvendelige for store 3D problemer. I stedet anvendes *iterative metoder*, og som navnet antyder foregår løsningen i en iterativ proces, hvor løsningen gentages et antal gange indenfor hvert tidsskridt indtil ændringen mellem iterationer er mindre end et angivet tolerancekriterium. Der er udviklet en række metoder herunder bl.a. Jacobi, Gauss-Seidel, "alternating direction implicit ADI" og "successive overrelaxation SOR". En af de nyere metoder er den såkaldte "preconditioned conjugate gradient method PCG". Almindelige brugere af veldokumenterede grundvandsmodelkoder behøver sædvanligvis ikke i detaljer at forholde sig til løsningsmetoden. I de fleste modeller er der mulighed for at vælge blandt nogle få udvalgte ligningsløsere. Under forudsætning af at metoderne er implementeret korrekt, er det stabiliteten af metoden og beregningstiden, der er de interessante parametre. En meget pragmatisk måde at vælge løsningsmetoden på, er derfor ad-hoc at afprøve de metoder modellen giver mulighed for at anvende og teste for følsomheden af udvalgte numeriske parametre f.eks. iterationskriteriet, og på grundlag af dette vælge den mest velegnede metode.

1.6 LITTERATUR

Anderson, M.P. and W.W. Woessber, *Applied Groundwater Modeling. Simulation of Flow and Advective Transport*, Academic Press, 1992

Freeze, R.A. and J.A. Cherry, *Groundwater*, Prentice-Hall, 1979.

Fetter, C.W., *Applied Hydrogeology*, Prentice Hall, 1994.

Kinzelbach, W., *Groundwater modelling*, Elsevier, 1986.

Press, W.H., S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery,

Kapitel 2 FORMÅLET MED OPSTILLING AF MODEL

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: numerisk model, partikelbanemodel, stoftransportmodel, fortolknings- og prognoseværktøj, formål, troværdighed, nøjagtighed, usikkerheder, alternative metoder

ABSTRACT: Numeriske modeller kan anvendes på forskellige trin i zoneringen. I forbindelse med zonerung er strømnings- og partikelbanemodeller centrale. Definition af formålet med modellering, krav til modelkompleksitet og nøjagtighed er vigtige spørgsmål, der skal besvares i det indledende trin i modelprotokollen. Forskellige typer simuleringer fx worst case, overslagsberegning og akvifer simuleringer stiller forskellige krav til overensstemmelsen mellem simulerede og observerede værdier. Alternativt til de numeriske model findes multikriterie metoder (jf. DRASTIC). Afhængigt af formål med et givent projekt og skala/datagrundlag, kan disse metoder udgøre brugbare alternativer til numeriske modeller eller kombineres med resultater fra modellerne.

2.1 HVORDAN KAN MODELLER ANVENDES I FORBINDELSE MED ZONERING?

Numeriske grundvandsmodeller (incl. overflademoduler) kan anvendes på flere niveauer i zoneringen, gående fra at opstille en grundvandsmodel på baggrund af eksisterende geologiske/hydrogeologiske data til først at opstille modellen, når detailkortlægningen i form af geofysisk kortlægning og supplerende kortlægning er gennemført. Tilsvarende kan numeriske grundvandsmodeller omfatte større eller mindre områder, gående fra hele amter/regioner/områder med særlige drikkevandsinteresser til enkelte indvindingsoplande.

En zonerung, hvor der har været anvendt en troværdig og velkalibreret numerisk grundvandsmodel, vil generelt give en mere pålidelig kvantificering af grundvandsdannelsens regionale fordeling, i forhold til simple metoder, anvendt på det samme datagrundlag. I tilgift kan numeriske grundvandsmodeller udnytte en større del af det samlede datagrundlag og derved bidrage til en bedre helhedsforståelse af det fysiske system.

Endelig giver en numerisk grundvandsmodel nogle væsentlige sidegevinster, idet ikke kun den arealdistribuerede grundvandsdannelse og infiltrationsområder til vandværker kan vurderes men også en lang række øvrige forhold, som er centrale i forbindelse med forvaltning og beskyttelse af vandressourcen, Henriksen et al. (1997):

- vurdering af transporttid gennem dæklag
- vurdering af opholdstider i grundvandsmagasiner
- afgrænsning af indvindingsoplande til vandværker
- analyse af potentiale- og gradientforhold
- vurdering af vandløbspåvirkninger som følge af vandindvinding
- analyse af stoftransport fra punktkilder og diffuse kilder (fx i forbindelse med indsatsplaner)

I relation til anvendelse af grundvandsmodeller i forbindelse med zonerung er det strømnings- og partikelbanemodeller, der i de fleste tilfælde er relevante, jf. tabel 2.1. Egentlige stoftransportmodeller til vurdering af f.eks. nitrat- eller pesticidtransport på regional skala eller til vurdering af udvaskning fra rodzonen (fx DAISY eller MACRO) kan formentlig være relevante i mere specielle tilfælde fx i forbindelse med arbejdet med indsatsplaner.

Indvindingsoplande og infiltrationsområder kan beregnes vha. partikelbanemodeller i forlængelse af strømningsmodelberegninger. Konkret sker dette ved at finde ud af, hvor partiklerne stammer fra, se f.eks. Refsgaard (1998), Refsgaard et al. (1997) og Henriksen et al. (1997). Tilsva-

rende kan partikelbanemodellerne anvendes til at beregne hastighederne af vandpartiklerne og herudfra bestemme alderen af det grundvand, som pumpes op ved kildepladserne. Endvidere kan partikelbanemodellerne anvendes til at beregne transporttider igennem f.eks. øvre dæklag i mættet zone.

Anvendes egentlige 3-dimensionelle procesorienterede stoftransportmodeller, er det muligt at lave egentlige simuleringer af f.eks. nitrattransport. Modeller til simuleringer af pesticiders opførsel i grundvandet på regional skala anvendes ikke i dag, men simplificerede metoder baseret på partikelbanemodellering, kortlægning af redoxforhold og pH, vurdering af opholdstider i aerob og anaerob zone vil formentlig kunne anvendes til vurderinger af pesticidnedbrydning/omsætning i grundvandszonen (fra grundvandsspejl til primære magasin / kildeplads).

En dynamisk og fysisk baseret numerisk hydrologisk model beskriver de væsentligste strømningsprocesser i landfasen af det hydrologiske kredsløb f.eks. snesmeltning, aktuel fordampning, afstrømning på jordoverfladen, i vandløb, over og under grundvandsspejlet samt drænvandsafstrømning. Denne model kan være organiseret som et samlet integreret modelsystem bestående af en række delkomponenter (moduler).

En numerisk grundvandsmodel beskriver kun processerne i mættet zone (under grundvandsspejlet). Beskrivelsen kan være stationær eller dynamisk. I en stationær numerisk grundvandsmodel må man specificere den arealdistribuerede grundvandsdannelse med en given fordeling over modelområdet. I en dynamisk grundvandsmodel kan denne fordeling yderligere antages at være tidsafhængig. I en dynamisk hydrologisk model er input til modellen fx. daglige nedbørs-, fordampnings- og temperaturværdier. Modellen beregner så på baggrund af parameterværdier og tilstandsvariable for umættet zone, grundvand, dræn og vandløb den arealdistribuerede grundvandsdannelse i hvert beregningstidsskridt/beregningsgrid.

Om man vælger at anvende en numerisk grundvandsmodel eller en integreret hydrologisk model (der indeholder en numerisk grundvandsmodel som en delkomponent) afhænger i første omgang af, hvad formålet er med modelopstillingen, men også datagrundlaget og de hydrogeologiske forhold kan spille ind. Til grundvandsmodellen er der ofte tilhørende modelkoder for partikelbane- eller stoftransportmodellering (tabel 2.1).

Tabel 2.1 Modeltyper og output

Modeltype	Hvad beregner modellen ?
Numerisk grundvandsmodel/ hydrologisk model	Strømningsforhold og trykniveauer i grundvandet, herunder grundvandsdannelse og afstrømning til f.eks. vandløb afhængigt af, om disse komponenter indgår i den hydrologiske model.
Partikelbanemodel	Partikelbaner og alder på partikel udsendt fra punkt på terrænoverfladen til en kildeplads eller fra kildeplads til punkt på jordoverfladen.
Stoftransportmodel	Transport og koncentration af stofpartikler under hensyntagen til dispersion, nedbrydning og adsorption Transport og koncentration af stofpartikler under hensyntagen til kemiske processer.

2.2 BRUG AF MODEL SOM FORTOLKNINGSVÆRKTØJ

Brugen af numeriske grundvandsmodeller kan bidrage til en bedre forståelse af det fysiske system, hvilket i nogle tilfælde kan være det primære formål med modellen frem for forudsigelser af absolute størrelser. Modellen vil altid repræsentere en væsentlig forenkling af det fysiske system og de tilhørende hydrologiske processer, og modellen kan ikke blive bedre end de data, der bliver lagt ind i den. Hvis datagrundlaget er sparsomt kan det derfor være vanskeligt at udvikle en god prediktiv model.

Modellen kan i fortolkningsmæssig sammenhæng anvendes som et værktøj i en fortsat proces, hvor det eksempelvis kan overvejes, om indsamling af nye data og resultater af detaljeret kortlægning bør give anledning til ændringer af den hydrogeologiske tolkningsmodel med tilhørende antagelser. Den arealdistribuerede grundvandsdannelse geografiske og tidslige variation til et givet grundvandsmagasin er et andet eksempel på anvendelse af modellen som et fortolkningsværktøj. Nøjagtigheden og dermed pålideligheden af grundvandsdannelsen afhænger bl.a. af udstrækningen af magasiner og beskaffenheden af dæklagene, og ved anvendelse af modellen vil det kunne undersøges, hvilke faktorer der har størst indflydelse på grundvandsdannelsen.

For hydrologen/hydrogeologen eller forvalteren af vandressourcen udgør modeller et værktøj som kan:

- give mulighed for analyser af det fysiske system
- benyttes som et middel til at organisere vores tænkning
- give analyser af hvilke parametre der er de mest følsomme
- angive hvor datagrundlaget er for spinkelt og dermed give anvisninger til videregående undersøgelser (detailkortlægning)
- hjælpe med til at formulere kritiske eksperimenter hvorved grundlæggende hypoteser kan testes
- belyse hvordan komplekse magasinsystemer reagerer på påvirkninger

2.3 BRUG AF MODEL SOM PROGNOSEVÆRKTØJ

I forbindelse med udarbejdelsen af indsatsplaner vil der være behov for vurdering af:

- simulering af udvaskning af f.eks. nitrat fra rodzonen (DAISY eller simple empirisk metode/typetal for bestemte jordtyper og klimazoner)
- vurdering af reduktionskapacitet i undergrunden med henblik på vurdering af resulterende påvirkning af grundvandet (kortlægning af geokemiske forhold, tilførsel af oxiderende stoffer, mængden af nedsivende vand samt mængden af reducerende stoffer, samt jordlagenes evne til evt. at gendanne reduktionskapacitet; tykke lerlag, pyritholdige lag mm. betyder ofte god reduktionskapacitet)
- partikelbane- eller stoftransportsimuleringer af transport og omsætning fra rodzonen til grundvandsmagasiner og kildepladser med henblik på at kvantificere, hvordan vandet strømmer, hvor meget af det unge grundvand der strømmer gennem områder med reduktionskapacitet og hvornår effekten af en evt. regulering af nitratudvaskningen kan forventes at vise sig i umættet zone, mættet zone og ved kildepladsen

I forbindelse med brugen af model som prognoseværktøj (fx i senere faser i forbindelse med detailprojektering af indsatsplaner) er usikkerhedsvurdering særligt påkrævet, såvel når det gælder den regionale numeriske grundvandsmodel incl. overflademoduler som når det gælder detailmodeller på mindre skala. Det stiller krav til:

- opstilling af usikkerhedsmål og nøjagtighedskriterier i udbudsmaterialet
- brug af standardiserede valideringstests (fx split-sample test)
- usikkerhedsestimater på input, konceptuel model og parametre med henblik på usikkerheds-estimat på modeloutput (fx grundvandsdannelse, simulerede koncentrationsniveauer mm.)

2.4 HVILKE SPØRGSMÅL SKAL MODELLEN GIVE SVAR PÅ – DEFINITION AF FORMÅL

I forbindelse med zoneringsmodeller, hvor modeller kan anvendes i forskellige sammenhænge eller trin, er det vigtigt at *formålet* med modelleringen for et givent projekt/projekttrin i første omgang defineres omhyggeligt, ligesom krav til modelkompleksitet, nøjagtighed mm. bør vurderes. Det vil sige:

- præciser de specifikke formål med modelsimuleringerne, herunder det nødvendige analyseniveau (modelkompleksitet),
- hvordan tænkes modelleringen at indgå i den samlede zoneafgrænsning? Er det en indledende modellering udfra eksisterende data, modellering i forbindelse med detailkortlægning eller brug af en model som prognoseværktøj i forbindelse med arbejdet med indsatsplaner?,
- diskuter hvilke type modelsimuleringer som skal laves med den numeriske grundvandsmodel og hvilke krav der skal stilles til modellens troværdighed, når det gælder simuleringernes nøjagtighed, og
- hvor følsomt er det for projektet/projekttrinnet at modelsimuleringerne eventuelt giver ukorrekte eller usikre resultater?

Der vil normalt gælde forskellige krav til troværdighed/nøjagtighed afhængigt af modellens anvendelse. Brown (1992) skelner mellem følgende typer modeller:

- Screeningsmodeller (begrænset krav til afvigelse mellem simuleringer og observationer; eksempler: kvalitative vurderinger af systemopførsel, vurdering af behov for data; worst case simulering)
- Overslagsberegninger (krav til god overensstemmelse mellem observationer og simuleringer er ikke strengt påkrævet; eksempler: vurdering af behov for yderligere dataindsamling; indledende faser i et projektforsøg)
- Akvifer simuleringer (krav om god overensstemmelse mellem simuleringer og observationer; eksempler: simulering af trykniveaufordeling, strømning og koncentrationer i tid og sted; grundlag for projektering af indsats; model med krav om høj troværdighed også benævnt high fidelity- "hi fi" simulering i engelsksproget litteratur)

I forbindelse med detailkortlægning og zoneringsmodeller, detaljerede indsatsplaner mm. vurderes det, at akvifer eller "hi fi" simulering oftest vil være påkrævet, idet formålet her er en kvalitetssikring af forståelsen af det fysiske system og brug af model som prognoseværktøj i forbindelse med indsatsplanarbejdet. I de indledende trin kan worst case eller konservativ simulering dog være tilstrækkeligt.

Der er i zoneringsvejledningen lagt op til, at den detaljerede afgrænsning af sårbare zoner skal baseres på den detaljerede hydrogeologiske tolkning, suppleret med grundvandsmodellering af den arealdistribuerede grundvandsdannelse geografiske og tidlige variation, samt partikelbanesimulering.

Anvendelsen af numeriske grundvandsmodeller i zoneringsmodeller skal afpasses såvel behov og datagrundlag som hydrogeologisk ramme. Det er altså op til myndighederne (amterne) at vurdere, om der ud over en overordnet numerisk grundvandsmodel er behov for detailmodeller, og hvilke yderligere modelanvendelser der er behov for under konkrete hydrogeologiske forhold og belastningsforhold i et givent område.

Der findes numeriske grundvandsmodeller til en meget bred vifte af problemkomplekser. En nærmere afgrænsning af formål og dermed krav til modellen er afhængig af såvel problemerne med vandressourcen i et givent område (grundvand/overfladevand, nitrat/pesticider, saltvandsindtrængning, punktkilder/diffuse kilder etc.), som den hydrogeologiske tolkningsmodel og datagrundlaget.

Kvantificering af usikkerheden er efterhånden blevet et krav i enhver modellering, så det er tit relevant at inddrage invers modellering/parameterestimering, Peck et al. (1988), til at analysere hvilke parametre der er særligt følsomme eller hvilke områder der er særligt usikker simulering. Derudover kan behov for yderligere observationer ("targets") evt. analyseres. Ved invers modellering anvendes et hjælpeprogram til at justere parameterverdier i modellen og styre generering af modelsetup, afvikling af kørsler samt udtræk af resultater (f.eks. PEST98 eller UCODE, se kapitel 10).

Modelløren definerer på forhånd hvilke parametre, der skal estimeres, samt evt. nogle intervaller som er acceptable. Det vil herigennem være muligt dels at få estimeret de parameterkombinati-

oner, som giver den bedste overensstemmelse i forhold til observerede trykniveauer og afstrømninger til vandløb, dels at få beregnet usikkerheder på parametre og dermed en vurdering af hvilke parametre, som er specielt vigtige at have viden om.

Egentlige usikkerhedsanalyser kan foretages ved en række stokastiske metoder, f.eks. Monte Carlo metoden (Freeze et al., 1990). Peck et al. (1988) påpeger, at Monte Carlo metoden muligvis er den stærkeste metode til usikkerhedsvurdering, idet denne metode er baseret på færre antagelser end andre metoder, er let at forstå, let at implementere og meget generel. Metoden er dog beregningstung og kræver et stort antal simuleringer. På baggrund af antagelser om fordelingsfunktionen af fx hydraulisk ledningsevne, genereres ved hjælp af geostatistiske metoder og målinger af ledningsevnen et stort antal realisationer af fordelingen af hydraulisk ledningsevne i et modelområde. Hver af disse realisationer gennemregnes efterfølgende og det samlede resultat analyseres med henblik på fastlæggelse af usikkerheder på fx simuleret trykniveau, nedsivning, partikelbaner eller stoftransport (Ruskauff, 1998).

Sammenfattende er der ved zonerings primært behov for følgende modelanalyser:

- Vurdering af grundvandsdannelsen til de enkelte magasiner, herunder arealmæssige fordeling og tidlige variationer under anvendelse af numerisk grundvandsmodel med overfladekomponenter (integreret hydrologisk model).
- Vurdering af grundvandsdannende oplande til magasiner og kildepladser eller vurdering af opholdstider i forskellige miljøer af grundvandszonen (aerob / anaerob) under anvendelse af stationær, evt. dynamisk numerisk grundvandsmodel med partikelbanesimuleringer.
- Brug af model som prognoseværktøj i forbindelse med udarbejdelse af indsatsplaner. Her kan der eksempelvis være behov for opstilling af rodzonemodel til vurdering af udvaskningen af nitrat eller andre stoffer løst koblet med en 3D grundvandsmodel (evt. incl. umættet zone model).

2.5 ER VALG AF EN NUMERISK GRUNDEVANDSMODEL DET RIGTIGE VÆRKTØJ TIL BESVARELSE AF DISSE SPØRGSMÅL?

I takt med at der vælges mere komplekse modeller, forventes det at nøjagtigheden af de simulerede resultater vil forbedres. Imidlertid sker der også en tilsvarende forøgelse i mængden af data, der er nødvendige for at opstille og kalibrere modellen. Data er nødvendige for at bestemme parameter-værdier og for at vurdere modelresultaternes usikkerhed.

En væsentlig begrænsning i forbindelse med modelopstilling er netop tilgængeligheden af repræsentative data. Repræsentativitet refererer her til såvel datakvalitet og mængden af data for på passende vis at repræsentere det modellerede område. Hvad er alternativet til opstilling af en numerisk grundvandsmodel, incl. evt. rodzone og/eller umættet zone model?

Udover de procesbaserede strømnings- og partikelbanemodeller, der beskrives i denne kagebog, findes der forskellige alternative metoder til vurdering af følsomme og sårbare områder:

- Multikriterie metoder
- Statistiske metoder

Metoderne af den førstnævnte type omfatter eksempelvis hydrogeologisk kortlægning bestående af en række temakort evt. inkluderende en score (en indekxværdi), som evt. vægtes. Den bedst kendte metode af denne type, DRASTIC, producerer relative frem for absolutte resultater (Aller et al., 1987, Hearne et al., 1995), og kan evt. anvendes i en indledende fase i forbindelse med vurdering af, hvilke områder der bør detailkortlægges, men er næppe anvendelig i forbindelse med udarbejdelse af indsatsplaner.

Statistiske metoder indeholder en vurdering af sandsynligheden for forurening af grundvandet på basis af relationer mellem på den ene side jordtype, hydrogeologi og kulturelle faktorer og på den anden side en kendt eller beregnet forureningsudbredelse. Der er ikke demonstreret eksempler på at metoder af denne type uden videre har kunnet overføres til andre hydrogeologiske forhold eller andre områder, end dem der ligger til grund for deres opstilling.

Egnethed af forskellige metoder i forbindelse med vurdering af et områdes generelle eller stofspecifikke følsomhed afhænger af, hvilken skala der arbejdes på.

Grundvandsmodeller incl. overflademoduler på regional skala er velegnede til vurdering af grundvandsdannelsen, som efterfølgende kan anvendes til vurdering af eksempelvis den samlede vandressources størrelse for et givent grundvandsmagasin, et regionalt opland eller et amt. DRASTIC vurderes anvendelig på regional skala til indledende vurderinger af behov for yderligere kortlægning, men man kan udmærket kombinere forskellige metodikker: grundvandsmodeller, vandtypebestemmelser/aldersdateringer og lertykkelseskort (eller dybder til redoxgrænsen) med henblik på indledende vurderinger af behov for yderligere dataindsamling/detailkortlægning.

På feltskala (1:5.000 eller mindre) som er den skala der skal arbejdes på i forbindelse med indsatsplaner på ejendoms- og markniveau er DRASTIC metodik problematisk, da de kun giver et relativt og ikke "stofspecifikt" resultat. I forbindelse med sårbarhedsvurdering (altså vurdering af såvel udvaskning fra rodzonen, infiltration og transport i umættet og mættet zone) vurderes også grundvandsmodeller incl. rodzonemodel og evt. umættet zone model at være velegnede (ASTM, 1997).

2.6 REFERENCER

- Aller, L.T., Bennet, T., Lehr, J.H., & Petty, R.J. (1987) DRASTIC: A Standardized System for Evaluating Ground Water Pollution Potential Using Hydrogeologic Setting, U.S. EPA Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, EPA/600/287/035, Ada, OK
- Anderson, M.P. & Woessner, W.W. (1992) Applied Groundwater Modelling. Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.
- ASTM, D 6030-96 (1997) Standard guide for selection of methods for assessing groundwater or aquifer sensitivity and vulnerability.
- Brown, D.M. (1992) The fidelity fallacy, *Ground Water*, Vol. 30, No. 4, 1992.
- Freeze, R., Massmann, J., Smith, L., Sperling, T. & James, B. (1990) Hydrogeological decision analysis: 1. A framework, *Ground Water*, v. 28, no.5
- Hearne, G.A., Wireman, M. Campbell, A., Turner, S. & Ingersoll, G.P. (1995) Vulnerability of the Uppermost Ground Water to Contamination in the Greater Denver Area, Colorado, *U.S. Geological Survey Water Resources Investigations Report 92-4143*.
- Henriksen, H.J., Rasmussen, P. & Knudby, C. (2000) Afprøvning af zoneringsmetoder, Miljøstyrelsen. Foreløbigt tryk. GEUS 1997 (publiceres elektronisk af Miljøstyrelsen medio 2000)
- Peck, A., Gorelick, S., de Marsily, G., Foster, S. & Kovalevsky, V. (1988) Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice. IAHS Publication No. 175. A contribution to the International Hydrological Programme of UNESCO (IHP III; project 2.4d). 1988.
- Refsgaard, A., Gregersen, J., Butts, M. & Kristensen, M. (1997) Indvindingsoplande og særlige drikkevandsområder, *Vand & Jord*, 4. årgang, nr. 3. juni.
- Refsgaard, A. (1998) Grundvandetets sårbarhed - Edb-modellering. *Vandforsyningsteknik* 47. Danske Vandværkers Forening.
- Ruskauff, G.J. (1998) Guide to using Stochastic MODFLOW for Monte Carlo Simulation. ESI.

Kapitel 3 OPSTILLING AF GEOLOGISK MODEL

Peter Gravesen

Kvartær- og maringeologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Geologisk variabilitet, sedimentologiske modeller, modeltyper, tilgængelige data, korrelation af lag, heterogenitetsforhold, manuelle og computerfremstillede modeller, skalaforhold.

ABSTRACT: En geologisk model er en idealiseret og simplificeret udgave af de komplekse, naturlige forhold, og modellen fremstilles for at forstå lagenes rumlige opbygning og deres strukturer samt de fysiske og kemiske processer som foregår i dem. Den geologiske model anvendes desuden som grundlag og "skelet" i den hydrogeologiske model, hvor de naturlige forhold yderligere bliver forsimplede. En god geologisk model kræver detaljerede data fra daglokaliteter, kortlægning, boringer og geofysik. Detaljeringsgraden afhænger selvfølgelig af formålet. Det kan imidlertid ofte være muligt at fremstille en geologisk model i et område ud fra foreliggende data, men kvaliteten på data, datatæthed mv. afgør pålideligheden.

3.1 INDLEDNING

De danske grundvandsmagasiner er helt overvejende opbygget af løse sand-grus aflejringer fra Kvartær, Tertiær, Jura og Kridt tidsafsnittene og kalkbjergarter fra Tertiær og Kridt. På Bornholm findes desuden også magasiner af sandsten, skifre og kalksten fra Palæozoikum og gnejs og granit fra Prækambrium. Forståelse for den geologiske variabilitet og beskrivelse af magasinernes rumlige opbygning er fundamentet for at forstå fysiske og kemiske processer, der foregår, når vandet bevæger sig gennem dæklag til magasinerne og ved vandtransport i selve magasinerne. Den geologiske model er dermed også vigtig ved opstilling og arbejde med hydrogeologiske modeller.

En geologisk model er en idealiseret og simplificeret udgave af de komplekse naturlige forhold, og modellen fremstilles for at forstå sedimenternes og bjergarternes rumlige opbygning og deres strukturer samt de fysiske og kemiske processer, som foregår i dem.

Oplysningerne om sedimenternes og bjergarternes udbredelse, sammensætning og alder baseres især på analyse af boreprøver og deres placering i boringer, men også geofysiske logs og overfladegeofysik indgår ved geologisk modellering (Hansen & Gravesen, 1996, Gravesen, 2000). Viden om de enkelte lags mulige udbredelse kan fås ved at opstille geologiske modeller, der er udviklet inden for den sedimentologiske videnskab, især i forbindelse med olie-gas efterforskning suppleret med traditionelle geologiske kortlægningsmetoder (Walker, 1984).

De sedimentologiske modeller bliver helt overvejende etableret på grundlag af daglokaliteter, hvor lagenes vertikale og horisontale udbredelser og variationer kan iagttages. De vigtigste egenskaber er laggrænser, kornstørrelse og sedimentstrukturer. Ud fra disse egenskaber er der blevet beskrevet en række teoretisk mulige modeller, der dog næsten aldrig genfindes komplette i naturen. Eksempler på modeller for løse sand-grus flodaflejringer er den type af flettede flodsystemer, der opbygger de danske hedesletter fra Weichsel tidsafsnittet og for ler-silt aflejringer, den type af søaflejringer som kaldes varv aflejret i et iskontaktmiljø ved Weichsel isen.

De vertikale og horisontale variationer i aflejringerne karakteriseres forudsagt ud fra de sedimentologiske modeller kan anvendes ved stor skala modellering af grundvandsmagasinerne, men i forbindelse med beskrivelse af vandstrømning og forureningstransport i grundvandet er der brug for flere detaljer og præcise rumlige beskrivelser til vurdering af den hydrauliske ledningsevne i lagene. Magasinernes hydrauliske ledningsevne kan variere inden for selv tynde lag for samme slags aflejring.

Under danske forhold kan hele lagseriekomplekset beskrives i forhold til flader og de geologiske enheder under eller over disse flader. Den øvre begrænsende flade er jordoverfladen og en omtale af dens topografi og geomorfologi foretages i afsnit 3.2. En anden flade som også er væsentlig, er prækvartæroverfladen, dvs. fladen der adskiller de kvartære aflejringer fra de ældre aflejringer, og den beskrives i afsnit 3.3. De geologiske enheder som indgår i grundvandsmagasinerne, deres dæklag eller andre begrænsende lag er omtalt i afsnit 3.4. Datatyper er kort beskrevet i afsnit 3.5, mens modeltyper, opstillingen af den geologiske model og dens usikkerheder omtales i afsnittene 3.6, 3.7, 3.8, 3.9 og 3.10.

De geologiske modeller og metoderne til at etablere dem, som beskrives i dette kapitel kan anvendes uanset hvor stor en datamængde der foreligger ved en konkret undersøgelse, men selvfølgelig vil modellens gyldighed øges, jo flere data der foreligger, og jo større tæthed disse data har.

3.2 JORDOVERFLADENS TOPOGRAFI OG GEOMORFOLOGI

Topografien er landskabets fysiske træk (forhold) som relieffet og konturerne, mens geomorfologi er læren om landskabets fysiske og geologiske former, dets dannelse og de ændringer der sker med dem. Topografien eller terrænforholdene, som foreligger på kort og digitalt, har væsentlig betydning for de hydrogeologiske forhold både ved grundvandsdannelse, nedsivning og strømning i magasinerne til vandløbene eller havet. Ved undersøgelser på f.eks. oplandsstørrelse er disse data helt centrale ved hydrogeologisk modellering. For at bedømme et landskabs opbygning er den geomorfologiske analyse en vigtig indgang, da der kan være sammenhæng mellem indholdet (sedimenterne) og f.eks. bakkernes og fladernes form. Det er helt overvejende de kvartære aflejringer, som vil indgå i analysen, og det kvartærgeologiske jordartskort giver i denne analyse sammensætningen i den øverste meter og dermed en indikation på indhold og dannelse. En opdeling af et område i geomorfologiske enheder kombineret med andre data kan anvendes både ved indledning til en undersøgelse og som et værktøj ved opskalering. Jordoverfladen og overfladen for de geomorfologiske enheder (ofte den samme) skal derfor altid indgå i modelleringen.

3.3 PRÆKVARTÆRETS HØJDEFORHOLD

Overfladen, der afgrænser de kvartære aflejringer fra de ældre prækvartære aflejringer, er en overflade der er skabt ved erosion, bassinindsynkning og fjernelse af materiale. Der er således en stor tidsmæssig forskel i og med, at det yngste tertiære tidssnit, Pliocæn, faktisk kun er truffet i én boring i Danmark helt nede ved grænsen til Tyskland. Pga. af indsinkingen og erosionen er der således en aldersforskel der strækker fra Nedre Kridt til Kvartær i Østdanmark og fra Prækambrium til Kvartær på Bornholm.

Prækvartæroverfladen har derfor været udsat for fysiske og kemiske processer gennem mange millioner år, og må formodes at have en variation i relieffet, der mindst ligner den nuværende danske jordoverflade. Når overfladen er blevet kortlagt ved hjælp af boringsdata (ved konturering), har der været et problem med for stor afstand mellem data. Dette bevirker altid en udglatning i relieffet, som antagelig ikke er korrekt. Geofysiske undersøgelser, især seismiske, elektriske og elektromagnetiske, kan medvirke til at forbedre datagrundlaget

Prækvartæroverfladen og dens jordarter/bjergarter har forskellig betydning i forhold til den geologiske model og de hydrogeologiske forhold. I nogle tilfælde begrænser de prækvartære aflejringer de kvartære, som når f.eks. kvartære sand- og leraflejringer i Århus området findes i dalsystemer i fedt tertiært ler. I andre tilfælde indgår de prækvartære aflejringer i grundvandsmagasinet, som når kvartær sand findes oven på tertiært kvartæssand i Vestjylland.

3.4 SEDIMENT/BJERGARTS ENHEDER

Stratigrafi er læren om de geologiske lags indbyrdes relationer, og hvis ikke andet har påvirket lagene end almindelige aflejningsprocesser, vil de ældste lag ligge nederst og de yngste øverst. Denne ideelle tilstand er baggrunden for den klassiske geologiske "lagkage"-model, hvor lagene opfattes at ligge regelmæssigt ovenpå hinanden. Denne tilstand gør mulighederne for at korrelere identiske/jævnaaldrende lag fra punkt til punkt relativt let. Dette kan også være rigtigt i situationer, hvor de stratigrafiske enheder er aflejret under ensartede forhold over lange horisontale stræk, som f.eks. langs en kyst. Den ideelle tilstand er desværre langt fra altid tilstede under danske forhold, i alt fald hvor det drejer om de kvartære aflejringer, mens det til en hvis grad kan siges at være rigtigt for kalkaflejringer fra Kridt og Tertær perioden samt marint kvartssand fra Miocæn. De kvartære aflejringer er præget af uregelmæssige aflejningsforhold og påvirkning af istidens gletschere, som har skabt både aflejningsmæssige og strukturelle heterogeniteter. I værste tilfælde ligger ældre lag ovenpå yngre.

3.5 DATATYPER

De geologiske modeller udarbejdes på grundlag af "hårde data": Direkte felldata fra daglokaliteter, geologisk kortlægning eller boringer og "bløde data": Geofysiske data og geologisk erfaring (og de teoretiske modeller).

De hårde geologiske data er ofte allerede eksisterende data som f.eks. boringsdata fra GEUS boringsdatabase og Borearkiv (Gravesen & Fredericia, 1984). Der findes p.t. ca. 270.000 boringer i borearkivet, hvoraf de ca. 215.000 er lagret i databasen. Boringsformål fordeler sig med 53 % vandforsyningsboringer, 22 % geotekniske boringer, 12 % råstofboringer, 6 % geofysiske shot holes og 8 % boringer i forbindelse med grundvandsovervågning, forureningsundersøgelser og videnskabelige undersøgelser.

De forskellige boringstyper indeholder information, som er relevant ved måde manuel og computerbaseret geologisk modellering. Den geologiske information er primært baseret på undersøgelser af boreprøver og oplysninger fra borefirmaet (f.eks. laggrænser). Boreprøverne giver oplysninger om bjergarts/jordartstype, hærtningsgrad, kornstørrelse, farve, bikomponenter, mineralogi, fossilindhold, kalkholdighed, og almindeligvis er dannelsesmiljø og alder også bestemt (Larsen et al., 1995).

Daglokaliteter og geologiske kort udgør en anden "hård" datakilde, hvor især kortene er anvendelige i digital form. Jordartskort, geomorfologiske kort og topografiske kort er, hvor der er tale om præsentation af observerede data, således et vigtigt databidrag. I nogle tilfælde er der dog på disse kort tale om fortolkning, som altid vil kunne diskuteres.

Geofysik har været anvendt ved grundvandsundersøgelser igennem længere tid. Data fra borehulslogs, især gammalogs, resistivitetslogs og induktionlogs, er vigtige hjælpemidler, når detaljer om lagfølgerne skal fastsættes i de enkelte boringer. Den usikkerhed, der er ved fastsættelse af laggrænser på basis af de udtagne boreprøver, kan elimineres ved at optage geofysiske logs i borehullet. Derudover kan de geofysiske logs påvise og placere heterogeniteter i lagfølgen (efter fortolkning) og kombineret med boreprøver give gode muligheder for at beskrive en lagfølge med høj præcision.

Det mest problematiske ved opstilling af geologiske modeller i relation til grundvandsmagasinerne er at bestemme beliggenhed af grænser mellem de enkelte enheder og enhedernes præcise udbredelse. Overfladegeofysik kan give informationer til at vurdere og fastsætte forbindelser mellem de større enheder. Seismik, georadar, slæbegeoelektrik og transiente elektromagnetiske målinger er de metoder, der især giver "bløde" data, som efter fortolkning til geologiske lag og strukturer giver bud på den overordnede opbygning af de geologiske forhold. Et eksempel herpå er kortlægning af sandvinduer i et i øvrigt sammenhængende morænelersdække over grundvandsmagasinet.

3.6 MODELTYPER

3.6.1 To- og tre-dimensionelle modeller (traditionelle deterministiske modeller)

To- og tre-dimensionelle modeller viser den rumlige geologiske opbygning i enten et profil eller ved flere profiler, der krydser hinanden (fence-diagrammer). De kan også vises som blokdiagrammer, hvor landskabets geomorfologi er medtaget. Fremstillingsmetoden er traditionelt manuel og velkendt fra den geologiske litteratur. Hvis data (f.eks. borerer eller geofysiske data) er lagrede i databaser kan der udtegnes profiler og diagrammer ud fra disse data, hvis der er programmel tilstede. Tolkningen vil altid kræve, at en geolog går aktivt ind i konstruktionen. Anvendelsen i den matematiske hydrogeologiske model indebærer, at data digitaliseres og indlægges i modellen. Hvis tolkede profiler eller fencediagrammer foreligger digitalt (i eksisterende programmer udarbejdet til formålet) kan de ofte bruges direkte. Metoden, der kan anvendes til udarbejdelsen, er beskrevet i Hansen & Gravesen (1996). Modellerne har den fordel, at der er en klar arbejdsgang, hvor det er let at indarbejde geologisk erfaring, samt at avanceret programmel ikke er en betingelse. Svaghederne er, at det svært at indarbejde nye data og at det kan være svært at arbejde i tre dimensioner. Desuden udarbejdes der normalt kun en modelmulighed på de foreliggende data, som er afhængig af den tolkende geologs erfaring.

6.3.2 Overflade modeller (konturerede modeller)

Overfladen modellen kan være en hurtig metode, hvis de geologiske forhold er rimeligt ukomplicerede. Der kan anvendes mange data, og modellen illustreres med konturerede overfladekort eller lagtykkelseskort. Modellen kan fremstilles manuelt, men det er en stor fordel, hvis data er databaselagrede, da der eksisterer mange muligheder for passende kontureringsprogrammel. Ved metoden skal der defineres hvilke overflader og lag, der skal kortlægges. Derfor startes med at vurdere de generelle geologiske forhold i området eventuelt ved konstruktion af et repræsentativt geologisk profil med terrænoverflade. Det er ligeledes vigtig at undersøge datakvalitet og opløselighed. Derefter opstilles søgekriterier til databasen for det pågældende område, og sådanne rutiner kan som regelen ikke bruges i andre områder. Kontureringsprogrammer kan sjældent løse problemer med dale og stejle gradienter, så derfor skal geologen følge en udtegnning af modellen op med verifikation af den ud fra geologisk viden og vurdering af inkonsistente data samt manglende centrale data. Fordele ved metoden er, at den er hurtig, hvis data er edb-lagrede og kan relativt let føres over i en matematisk model. Store datamængder kan behandles og nye kan let indføres. Svagheder er, at modellen er relativ simpel, og at den ikke kan tackle forstyrrede, hældende eller foldede lag. Desuden skal de konturerede kort altid justeres ud fra geologisk erfaring, hvilket er særlig påtrængende ved edb-fremstillede modeller. Et eksempel på et værktøj til fremstilling af en overflademodel er den grafiske editor, GeoEditor (Jacobsen & Hansen, 1998).

6.3.3 Geostatistiske modeller (stokastiske modeller)

Ved geostatistiske modeller kan data anvendes på en anderledes måde, bl.a. hvis de kombineres med stokastisk modellering. Udgangspunktet er de samme data, som for de ovenstående modeller, hvor både hårde og bløde data kan indgå. Ved denne form for modellering er det praksis altid at bevare de hårde data (f.eks. boredata) i målepunkter for derefter at kunne fremstille en serie af modeller, som alle honorerer disse hårde data. Et forsøg på en stokastisk modellering ses i Hansen og Gravesen (1996), hvor modelleringen kan sammenholdes med en deterministisk modellering for det samme område. De stokastiske modeller har imidlertid en række problemer angående opskalering, mangel på data og kalibrering. Et problem er også antallet af modeller, som er lige sandsynli-

ge, hvor kun en skal anvendes i den matematiske modellering, ligesom at denne model skal relateres til profiler eller kort. En fordel ved stokastiske modeller er, at de samlet giver et bud på den geologiske variabilitet, hvilket statiske modeller ikke kan.

3.7 KORRELATION AF LAGFØLGEOPLYSNINGER FRA BORINGER

Skalaen og datagrundlaget er centrale kriterier for måden at opstille en geologisk model på. Datamængde og – kvalitet varierer meget i de forskellige dele af landet. I områder, hvor der har været intens boringsaktivitet i forbindelse med etablering af kildepladsområder til vandværker eller ved forskningsprojekter, vil boringstæthed og datakvalitet være væsentlig større end i områder med spredte husholdnings- og markvandingsboringer.

En geologisk model kan selvfølgelig opstilles ud fra både få og mange data. Mange data er nødvendige, når der skal bruges detaljer omkring de væsentlige parametre: Grundvandsmagasinerne og dæklagenes sammensætning og indre strukturer. Herunder data om interne heterogeniteter og deres udbredelse og afgrænsninger, dvs. laggrænser, tektoniske forstyrrelser og andre barrierer. Der vil i de fleste tilfælde i forbindelse med zonerne være behov for indsamling af supplerende geologiske data.

Databehovet for en manuelt opstillet geologisk model er stort, men datamængden kan dog også blive så stor at overskueligheden tabes. De fleste computerfremstillede modeller (konturerede modeller, statistiske modeller) vil også have et stort krav til datamængden, men vil altid være endnu mere forsimplede udgaver af de geologiske forhold end de manuelle.

Opstillingen af den geologiske model med udgangspunkt i boringsdata er i al simpeltid et spørgsmål om at korrelere lag af samme alder fra boring til boring. Det er sjældent, at alle lag i en boring er aldersdateret på en måde, så korrelationen kan foregå entydigt. Derfor kommer de etablerede sedimentologiske modeller ind i billedet, som giver forslag til, hvordan de faktiske lag i boringerne kan være dannet og placeret i forhold til hinanden.

Konstruktion af to- og tre-dimensionelle modeller indeholder et væsentlig element af tolkning, som må baseres på kendskab og erfaring fra kendte modeller (Anderson, 1989, 1990, Walker 1984). Når først den geologiske model er etableret, kan denne anvendes videre til udarbejdelse af en hydrogeologisk tolkningsmodel (se afsnit 4). De geologiske modeller vises ofte som tværprofiler, der sammenstilles i fencediagrammer eller blokdiagrammer eller som flader eller grafik på kortflader.

Uanset den valgte modeltype er korrelationen mellem information fra boreprøvebeskrivelser, tolkning af borehulslogs og information fra daglokalitetsbeskrivelser og sedimentmodeller opstillet ud fra disse, nøglen til at en brugbar model kan udarbejdes.

Korrelation af sammenhængende og jævndrende lag foregår lettest, hvis de er aldersbestemte. Dette foregår ud fra dyre- og plantefossiler, som især findes i aflejringer dannet i havet. Eksempler herpå er interglaciale aflejringer fra Eem (Cyprina-lag) og Holstein havene, som har stor udbredelse i Danmark. De marine lag fra Øvre Kridt (skrivekridt) til Øvre Tertiær (Miocæn: Gram, Hodde og Arnum Formationerne) er andre eksempler på aflejringer, der kan aldersdateres ud fra fossiler. Ikke-marine lag fra søer og moser kan dateres på plantefossiler og dermed korreleres, men disse lag har sjældent større horisontal udbredelse. Begge typer aflejringer kan også i nogle tilfælde dateres ud fra målinger på radioaktive isotoper.

Når det drejer sig om istidsaflejringerne, smeltevandsaflejringer og moræneaflejringer, som dominerer de øvre jordlag i Danmark, kan korrelationen være vanskelig på grund af manglen på fossiler. Her må lagene korreleres ud fra deres sammensætning og strukturer, og da vil de sedimentologiske modeller give muligheder med hensyn til bedømmelse af jordartsvariation og de sedimentære og tektoniske strukturers karakter og skala. Daglokaliteterne giver også informationer om de interne heterogeniteter og forbindelsesmuligheder mellem aflejringer, som kan optræde som grundvandsmagasiner.

Ud fra den kombinerede tolkning af dannelsesmiljø for aflejringerne og fastsættelse af laggrænser konstrueres geologiske tværprofiler eller kort over flader, vel vidende at områderne mellem bo-

ringerne kun kan tolkes ud fra kvalificerede vurderinger og ekspertise. I områder med tætliggende borerer med den nødvendige dybde og få forskellige lag vil denne geologiske model være tilstrækkelig (f.eks. områder med tyndt kvartært dække på kalkaflejringer). Hvis datatætheden er for ringe vil det være nødvendigt at supplere med flere borerer og/eller overfladageofysik. Hvilke metoder der skal anvendes, afhænger f.eks. af forskelle i aflejringsstyper, forventninger til strukturelle forhold og skalaforholdene.

3.8 FORBEDRING AF GEOLOGISK MODEL UD FRA OVERFLADEGEOFYSIK

Hvis der skal føjes flere oplysninger på den geologiske model vil de geofysiske metoder bidrage til beskrivelse af storskala heterogeniteterne i magasinerne og de mulige forbindelser mellem flere magasinenheder. Derudover bidrager de geofysiske data til fastsættelse af laggrænserne mellem enhederne i områderne mellem borerer og til vurdering af hovedjordartstypernes fordeling (f.eks. ler, sand, grus)

De geofysiske data skal tolkes og udtegnes på papir eller foreligge digitalt enten som profiler eller som kort. Det er hensigtsmæssigt at udtegne (konstruere) de geofysiske data i profiler med samme beliggenhed og målestok som de geologiske. Hvis udtegningen forgår på kort, vil det være nødvendigt at omsætte disse horisontale data til vertikale profiler, hvis der er tale om en to- eller tre-dimensional model.

Tolkning og omsætning af f.eks. elektriske modstandsværdier til sediment- og bjergartstyper understøtter beskrivelsen af de vigtigste geologiske enheder og fastlæggelsen af deres udbredelse. Dette sker ved sammenligning med kendte modstandsværdier for danske sedimenter og bjergarter. Derefter kan områder med samme sammensætning afgrænses, respekterende de allerede registrerede grænser mellem aflejringerne især fra de "hårde data".

Den endelige geologiske model opstilles derefter ved at samarbejde de geologiske og geofysiske profiler, kort og data, således at alle data anvendes til at konstruere den endelige geologiske model. Det er vigtigt at markere, hvor modellen er baseret på borerer og geofysik, og hvor den alene er konstrueret ud fra en geofysisk tolkning. Det gøres bedst ved at vise borerernes beliggenhed og dybde.

De rumlige relationer kan nu vises ved, at flere krydsende profiler sammenstilles som et fence-diagram eller blokdiagram, der viser lagenes udbredelse i tre dimensioner. Arbejdet med at sammenstille disse diagrammer involverer ofte endnu en vurdering af lagenes vertikale og horisontale udbredelse, specielt i de punkter, hvor profilerne krydser hinanden.

3.9 DETALJER I EN GEOLOGISK MODEL

I nogle sammenhænge vil detaljer om de geologiske lag have stor betydning for etablering af f.eks. en beskyttelsesstrategi. Disse detaljer, som typisk indsamles under feltundersøgelser fra daglokaliteter, udgravninger og borerer, findes i sagens natur kun fra et fåtal af områder. Kortlægning af sammenhængende lerdækker over magasinerne anvendes som et vigtigt element i beskyttelsesstrategien overfor grundvandet. Detaljer om heterogeniteterne i leraflejringerne i form af kornstørrelsefordelinger, sand- og gruslinser og makroporer, som har betydning for vand- og stoftransport ned gennem leraflejringerne til grundvandet, er undersøgt på lokaliteter spredt over landet, og et billede af f.eks. makroporefordelinger og deres betydning inden de øverste 5-6- meter er ved at danne sig (f.eks. Klint & Gravesen, 1999). Det er påvist, at der sker transport gennem makroporer til grundvandet, men detaljerede undersøgelser angående sprækker, ormehuller og rodhullers hydrauliske betydning og variation mangler stadig. Sprækker i moræneler optræder på alle undersøgte lokaliteter, men i forskellig mængde og opbygning, men disse oplysninger skal ligesom f.eks. kornstørrelsesvariationer underkastes en nærmere gennemgang for at estimere de hydrologiske og hydrauliske parametre, som kan opstilles ud fra dem.

Mulighederne for at regionalisere eller opskalere detailviden fra enkelte lokaliteter skal hæftes op på sammenhæng mellem egenskaber i de sedimentære enheder, deres dannelse og sammenhæng med de geomorfologiske enheder, som strækker længst udenfor den enkelte lokalitet. Når denne sammenhæng er etableret vil det være muligt at medtage langt flere detaljer ved den hydrogeologiske modellering.

3.10 USIKKERHEDER PÅ GEOLOGISK MODEL

Usikkerheder på den geologiske model afhænger af usikkerhederne på data og den senere behandling af dem.

Boringernes alder og de forskellige formål resulterer i forskellig opløsning med hensyn til indsamlingstæthed i borerne (antal undersøgte prøver) og information fra hver prøve (antal undersøgte parametre). Derudover er afstanden mellem borerne og deres dybde af betydning ved opstilling af modellerne. Disse forhold, som varierer fra sted til sted, må vurderes i hvert enkelt tilfælde, bl.a. af hensyn til den mængde af yderligere data, der skal indsamles. De "hårde" boringsdata kan relativt let indarbejdes i modellen på det sted, hvor de er indsamlet (borestedet), men det er vanskeligt at illustrere nøjagtigheden ved deres rumlige fordeling og variabilitet.

Når oplysninger skal bruges ved en videre vurdering af magasinets egenskaber, er tilstedeværelsen af heterogeniteter meget væsentlig. Den præcise rumlige placering af heterogeniteterne kan kun fastlægges, hvis der er en stor datatæthed fra f.eks. borerne, men en tilstrækkelig datatæthed er normalt ikke tilstede.

Etablerede modeller giver derfor nogle overordnede retningslinier for, hvordan forholdene kan være nede i magasinet, men ofte kun på en "regional" skala, som går ud over en mere specifik lokalitet. Problemer med at gå i detaljer er omtalt ovenfor. Foruden de primære heterogeniteter dannet ved lagene/bjergarternes aflejring eller dannelse, er især tektoniske forstyrrelser af magasinerne en parameter, der forøger den samlede mængde af heterogeniteter i magasinet og som gør dem mere uforudsigelige. Det må altid huskes, at modeller er kun eksakte i de hårde data punkter. Uden for disse er det et spørgsmål om kvalificeret tolkning.

3.11 PRAKTISKE EKSEMPLER PÅ TOLKNING AF HYDROGEOLOGISKE MODELLER

Der er som nævnt ovenfor en række forskellige tolkningsmetoder, der kan benyttes til opstilling af en hydrogeologisk model i 3D. Metoderne kan beskrives ved følgende 5 typer:

1. Digitalisering af profiler og efterfølgende interpolation mellem profiler til modelgrid
2. Tolkning i punkter og efterfølgende interpolation mellem punkter til modelgrid
3. Profil-tolkning i grid jf. DK-model Øerne og efterfølgende interpolation fra geologisk tolkningskala til numerisk gridskala
4. Slice-tolkning i faste dybdeintervaller af dominerende jordtyper (f.eks. 1 x 1 km i 10 m's dybdeintervaller jf. DK-model Jylland)
5. Tolkning ved hjælp af 3D geologisk tolkningsværktøj f.eks. GeoEditor, som giver mulighed for en bedre struktureret tolkning af borerne/geofysik og evt. støttepunkter og efterfølgende overførsel til modelgrid

Metode 1 og 2 har været anvendt i et begrænset antal eksempler i Danmark. Metode 3 og 4 er nærmere beskrevet på www.vandmodel.dk. For en tolkning ved hjælp af GeoEditoren (metode 5) henvises til: http://www.dhissoftware.com/mikeshe/Description/GIS_Geo_Editor/index.htm.

Profil-tolkning har været den hyppigst anvendte metodik gennem en årrække, men metoden har begrænsninger, idet det er noget vanskeligt at opdatere den geologiske model med nye data (fx nye borer, geofysik mm.). Slice-tolkning giver en række fordele med hensyn til en lettere opdatere-

ring af den geologiske model. En ulempe ved slice-tolkning er at kun den dominerende jordtype/bjergart repræsenteres i hvert grid, hvilket dog i nogen grad modsvares af fordele med hensyn til det regulære grid, som i øvrigt er lettere at arbejde med i forbindelse med yderligere op- og nedskalering.

3.12 REFERENCER

- Anderson, M.P. (1989) Aquifer heterogeneity - A geological perspective. Proceedings Fifth Canadian-American Conference on Hydrology, Calgary, Canada, 1990, 3-21.
- Anderson, M.P. (1990) Hydrogeologic facies models to delineate large-scale spatial trends in glacial and glaciofluvial sediments. Bulletin Geological Society of America, vol. 101, 501-511.
- Gravesen, P. (2000) Geologiske modeller. Appendix A i Vejledning fra Miljøstyrelsen: Detailkortlægning af arealer til beskyttelse af grundvandsressourcen. Zonering.
- Gravesen, P. & Fredericia, J. (1984) ZEUS-geodatabase system. Borearkivet. Danmarks Geologiske Undersøgelser, Ser. D, nr. 3, 259 sider.
- Hansen, M. & Gravesen, P. (1996) Geological modelling. In: Abott, M.B. & Refsgaard, J.C. (red.): Distributed Hydrological Models, Chapter 10, 193-214. Kluwer Academic Publishers.
- Henriksen, H.J., Harrar, B., Morthorst, J., Nyegaard, P. & Dahl, M. (1995) Nye vandindvindingsmuligheder for Esbjerg kommune. Fase IV-model. DGU Kunderapport nr. 51, 1995,
- Jacobsen, T.V. & Hansen, M. (1998) Geological modelling and editing in GIS environment. Proceedings of the Third International Conference on Hydroinformatics, Copenhagen, Denmark, 24-26 August 1998: HYDROINFORMATICS '98. Eds.: Vladan, B. & Larsen, L.C., vol. 1. A.A.Balkema, Rotterdam, pp. 525-530.
- Klint, K.E.S. & Gravesen, P. (1999) Fractures and Biopores in Weichselian Clayey Till Aquitards at Flakkebjerg, Denmark. Nordic Hydrology, 30, 4/5, 267-284.
- Larsen, G., Frederiksen, J., Villumsen, A., Fredericia, J., Gravesen, P., Foged, N., Knudsen, B. & Baumann, J. (1995) Vejledning i Ingeniørgeologisk prøvebeskrivelse. Dansk Geoteknisk Forening. Bulletin 1, 135 sider.
- Walker, R.G. (1984) Facies Models. Geoscience Canada, Reprint Series 1, 317 sider.

Kapitel 4 OPSTILLING AF HYDROGEOLOGISK TOLKNINGSMODEL

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Konceptuel model, hydrologiske processer, geologi, strukturelle forhold, hydrostratigrafiske enheder, tidsperioder, parameterfastsættelse og usikkerhed

ABSTRACT: En hydrogeologisk tolkningsmodel indeholder brugerens opfattelse af de vigtigste hydrologiske processer og geologiske forhold og kan således opfattes som brugerens overblik og afgrænsning af hvad der er nødvendigt at inkludere i de efterfølgende numeriske beregninger. Hvilke hydrologiske processer og geologiske strukturer skal inddrages? Hvilken grad af kompleksitet er nødvendig? Fastlæggelse af hydrostratigrafiske enheder. Stationær og dynamisk model. Valg af tidsperiode til kalibrering og validering. Parameterfastsættelse ud fra geologiske og hydrologiske data. Vurdering af usikkerhed på konceptuel model.

4.1 DEFINITION

En hydrogeologisk tolkningsmodel indeholder brugerens opfattelse af de vigtigste hydrologiske processer og geologiske forhold. Endvidere indeholder den de simplifikationer, som forventes at være acceptable i en numeriske model, selv om den skal kunne opfylde de målsætninger brugeren stiller til modelleringsværktøjet i den konkrete opgave. De enkelte elementer i tolkningsmodellen er beskrevet i nedenstående afsnit 4.2-4.7.

En hydrogeologisk tolkningsmodel kan således opfattes som brugerens overblik og afgrænsning af hvad det er nødvendigt at inkludere i de efterfølgende numeriske beregninger.

En hydrogeologisk tolkningsmodel er en visuel eller skitse-mæssig beskrivelse af grundvandets strømningssystem, ofte i form af "blokdiagrammer", "tværsnit" og "plankort". Egenskaberne ved den hydrogeologiske tolkningsmodel er bestemmende for dimensionerne i den numeriske model og designet af modellens beregningsnet.

4.2 AFGRÆNSNING AF OMRÅDE

På baggrund af formålet med den konkrete opgave og områdets hydrologiske og geologiske karakteristika foretages der en geografisk afgrænsning af det område, der skal medtages i modellen.

Vigtige overvejelser i den anledning er, at området skal være så tilpas stort, at de valgte randbetingelser ikke får uønsket stor indflydelse på beregningsresultaterne, se ståbiens kapitel 6.

Så vidt muligt bør systemets naturlige hydrologiske grænser honoreres i forbindelse med afgrænsning af modelområdet (overordnede grundvandskel, udbredelse af magasiner, topografiske oplande, betydning af vandløbssystemer, vandindvinding mm.), men i praksis kan det være nødvendigt at begrænse eller trunkere modelområdets størrelse, således at der er behov for at specificere randbetingelser, der ikke er sammenfaldende med naturlige hydrologiske grænser der optræder i det givne system. Under alle omstændigheder bør den konceptuelle model forholde sig til og be-

skrive de "sande" hydrologiske grænser, også beliggende udenfor det evt. "trunkerede" modelområde.

4.3 HVILKE HYDROLOGISKE PROCESSER OG GEOLOGISKE STRUKTURELLE FORHOLD SKAL INDRAGES?

En vigtig beslutning i forbindelse med opstilling af den hydrogeologiske tolkningsmodel er hvor stor en del af det hydrologiske system, det er nødvendigt at medtage i modellen, dvs.:

- Skal processerne i rodzonen og den umættede zone medtages direkte i modellen? I givet fald skal modellen benytte klima inputdata og selv beregne den aktuelle fordampning. I modsat fald skal nedsivningen til det øverste frie grundvandsspejl skønnes på anden vis.
- Skal overfladevandssystemerne medtages direkte i modellen? I givet fald skal modellen indeholde beskrivelse af vandløbssystemer og søer. I modsat fald skal deres indflydelse repræsenteres ved et passende sæt af øvre/indre randbetingelser i modellen.

Disse spørgsmål er specielt vigtige i forbindelse med stillingtagen til hvor godt modellen skal kunne simulere de naturlige klimagenererede dynamiske forhold, såsom årstidsvariationer af trykniveauer og variationer i afstrømning og vandstand i vandløb og søer.

Endvidere skal der tages stilling til hvilken grad af kompleksitet, det er nødvendigt at medtage i modelbeskrivelsen. Typiske spørgsmål i den sammenhæng vil være:

- Hvor kompleks skal simuleringen af den umættede zone være? Er det nødvendigt at tage hensyn til tensionsforhold (dvs. Richards' ligning) eller er gravitationsstrømning eller blot en boksmodel tilstrækkelig?
- Skal der tages hensyn til preferentielle strømningsveje i den umættede zone eller skal disse forhold indkorporeres i form af effektive parameterverdier?
- Skal der tages hensyn til den rumlige variation af parameterverdier i den umættede zone eller skal disse forhold indkorporeres i form af effektive parameterverdier?
- Skal der tages hensyn til linser eller sprækkezoner i den mættede zone?
- Skal der tages hensyn til densitets effekter i den mættede zone?

Det er ikke muligt at give generelle entydige svar på ovenstående og lignende spørgsmål, som skal afklares i forhold til den specifikke målsætning og de lokale hydrogeologiske forhold. Tabel 4.1 indeholder dog nogle vejledende betragtninger.

4.4 FASTLÆGGELSE AF HYDROSTRATIGRAFISKE ENHEDER

Med baggrund i den geologiske model (Kapitel 3) og formålet med den givne opgave beslattes detaljeringsgraden og strukturen af de geologiske informationer, der skal indgå i modellen. Typiske valgmuligheder vil være:

- En to-dimensional beskrivelse af de vandførende lag. Dette indebærer, at der foretages en vertikal midling over hele lagpakken, og at de hydrauliske forhold beskrives i form af transmissiviteter.
- En quasi tre-dimensional beskrivelse med en opdeling i et antal geologiske lag. Dette indebærer ofte, men ikke nødvendigvis, skiftevis lag af vandførende og lavpermeable lag (henholdsvis akviferer og akvitarder).
- En fuld tre-dimensional beskrivelse.

I langt de fleste situationer i Danmark vil det som følge af de geologiske forhold være nødvendigt eller fordelagtigt at bruge 3D grundvandsmodeller ved zonerings, når det drejer sig om vurderinger af, hvor grundvandet dannes og ved afgrænsning af indvindingsoplande og ved vurdering af grundvandets trykforhold og transporttid gennem dæklagene. I områder hvor geologien er mere simpel, kan der ofte bruges simple metoder, men områderne afgrænses bedre med 3D modeller.

I et østdansk område kunne en typisk sekvens af hydrostratigrafiske enheder eksempelvis være som følger (jf. DK-model Sjælland, med 11 lag fra top til bund): 1. et vandførende lag opsprækket

moræner af få meters tykkelse, 2. et forholdsvis lavpermeabelt lag bestående af moræner og evt. sen- og postglaciale ler, 3. et vandførende lag eller snarere linser af smeltevandssand og grus, som udgør sekundære magasiner, 4. et lavpermeabelt lag bestående hovedsageligt af moræner evt. også af smeltevandsler og –silt (dæklag til det primære smeltevandsmagasin mange steder), 5. et vandførende lag af smeltevandssand og –grus, 6. et lavpermeabelt lerlag bestående hovedsageligt af moræner evt. også smeltevandsler og –silt, 7. et vandførende lag af smeltevandssand og –grus, som udgør et regionalt nedre primært magasin specielt i Nord- og Vestsjælland samt på Lolland (laget mangler dog på Østsjælland og på Møn), 8. et lavpermeabelt lerlag bestående hovedsageligt af moræner evt. også af smeltevandsler og –silt (laget mangler i nogle områder bl.a. Nordsjælland), 9. et vandførende lag af smeltevandssand og grus, som et dybtliggende nedre primært magasin, der især findes i dybe sænkninger i den prækvartære overflade som i Nordsjælland og på Lolland, 10. et lavpermeabelt lerlag bestående hovedsageligt af Kvartær ler og silt samt prækvartære aflejringer (Palæocæn og Eocæn ler), i en del områder findes laget ikke og der er derfor hydraulisk kontakt mellem det overliggende kvartære sand og de prækvartære vandførende aflejringer og 11. vandførende prækvartære kalkaflejringer fra Danien og Kridt samt Danien grønsandsaflejringer.

4.5 FASTSÆTTELSE AF TIDSPERIODER

Grundlæggende kan der skelnes mellem en dynamisk model og en stationær model.

En stationær grundvandsmodel beskriver en stationær situation med konstante forhold med hensyn til nettonedbør/grundvandsdannelse, trykniveauforhold, udveksling med vandløb, oppumpninger, mv. En stationær model er relativ simpel at opstille, kræver begrænset regnetid og er velegnet til invers kalibrering (Kapitel 10). En stationær model er i nogle situationer tilstrækkelig til at opfylde den givne målsætning, mens den i andre situationer vil være et naturligt første skridt i en kalibreringsproces.

Ved en dynamisk grundvandsmodel tages der hensyn til variationer af eksterne påvirkninger over tiden. Det kan være tidsvarierende oppumpninger eller naturlige variationer i nedbørsforhold. Eftersom overfladevandssystemet er præget af betydelige klimagenererede naturlige variationer er dynamiske modeller specielt vigtige ved studier af vandudvekslingen mellem overfladevands-, herunder vandløb, og grundvandssystemer. Dynamiske modeller er mere komplekse, men er også i stand til at udnytte informationer, som en stationær model ikke kan. Det drejer sig fx om data for årstidsvariationer af observerede trykniveauer, som indeholder væsentlige informationer af betydning for tolkning af grundvandsdannelsen og samspillet mellem forskellige akviferer.

Ved valg af tidsperiode skal der tages hensyn til, at der som regel vil være behov for både en periode til modelkalibrering (Kapitel 10) og en uafhængig periode til modelvalidering (Kapitel 11). Såfremt oppumpningsforholdene er nogenlunde konstante vil der typisk være behov for to perioder af 5-8 års længde.

4.6. PARAMETERFASTSÆTTELSE UD FRA GEOLOGISKE INFORMATIONER OG HYDROLOGISKE DATA

Distribuerede hydrologiske modeller er opbygget således, at den rumlige variation af fx et områdes geologiske karakteristika beskrives ved at give forskellige parameterverdier i de forskellige beregningspunkter, som området beregningsmæssigt er opdelt i. Eftersom en model oftest opererer med flere tusinde beregningspunkter, som hver karakteriseres med adskillige parametre, kan antallet af parametre blive i 10.000vis, som principielt alle kan have forskellige værdier. Hvis alle disse parameterverdier betragtes som frie parametre, vil det af flere grunde give uoverstigelige problemer. For det første ville det i praksis være uoverkommeligt at estimere alle disse parameterverdier. For det andet vil man ud fra en teoretisk statistisk betragtning nemt kunne overbevise sig om, at estimering af så mange frie parameterverdier med en blot nogenlunde acceptabel statistisk sikkerhed vil være fuldstændig urealistisk, således at modellen måske nok vil kunne bringes til at fitte de eksiste-

rende feltdata, men på grund af de mange frihedsgrader ikke vil have nogen prediktionsevne og dermed ikke vil have nogen værdi i praksis.

En rigoristisk metode til fastsættelse af parameterverdier (parametrisering) er af afgørende betydning for at undgå metodiske problemer i de efterfølgende trin med modelkalibrering og -validering. Ved parametrisering fastsættes de rumlige mønstre af parameterverdierne således at en given parameter kun afspejler de signifikante og systematiske variationer, som kan beskrives ved de tilgængelige feltdata. Det kan fx ske ved at benytte repræsentative parameterverdier for individuelle jordtyper, vegetationstyper og geologiske lag. Parametriseringsprocessen kan således i meget betydeligt omfang reducere antallet af frie parametre som det er nødvendigt at estimere i den efterfølgende kalibreringsproces. I parametriseringen er det vigtigt at tage følgende hensyn (Refsgaard and Storm, 1996):

- Parameterklasserne (jordtyper, vegetationstyper, klimazoner, geologiske lag mm.) skal vælges så det bliver let på objektiv vis at tilknytte parameterverdier. Parameterverdierne bør således i højst muligt omfang kunne estimeres ud fra tilgængelige feltdata.
- Det bør eksplicit vurderes hvilke data der kan estimeres alene ud fra feltdata og hvilke der behøver kalibrering. For de parametre, der skal estimeres ud fra kalibrering, bør der fastsættes fysisk acceptable intervaller.
- Antallet af kalibreringsparametre bør af såvel praktiske som metodiske grunde holdes så lille som muligt. Dette kan fx gøres ved at fastsætte en parameters rumlige mønster og tillade dens absolutte værdi at blive varieret gennem kalibreringsprocessen, i stedet for at lade parameteren variere frit i alle beregningslementer.

4.7 SKALERINGSEFFEKTER

En komplicerende faktor ved fastsættelse af parameterverdier direkte ud fra feltdata udgøres af skalaproblemet. Herved forstås eksempelvis, at punktobservationer ikke nødvendigvis også repræsenterer "effektive" parameterverdier på den skala (= beregningselement) som en model opererer på. Der findes ikke i dag nogen opskaleringsmetodik, som kan benyttes generelt. Den bedste måde at opnå præcise skøn over effektive parameterverdier, som bedst muligt beskriver grundvandshydraulikken i et akvifersystem, er derfor ofte at foretage kalibrering af et antal hydrauliske parametre (se kapitel 10). Som beskrevet i ovenstående afsnit 4.6 er det dog meget vigtigt at benytte geologiske informationer som grundlag for at identificere parameterklasserne og hermed de parametre, der skal fastsættes gennem kalibrering.

4.8 USIKKERHED PÅ KONCEPTUEL MODEL

Som afslutning på etableringen af den konceptuelle model er det vigtigt at vurdere hvorvidt den er tilstrækkelig til den foreliggende opgave. I den forbindelse er det nødvendigt at overveje hvilke usikkerheder der er knyttet til de tolkninger, der ligger til grund for den konceptuelle model.

Normalt, når usikkerhederne på numeriske modeller analyseres, tages der kun hensyn til usikkerhed på input data (fx klimadata) og usikkerhed på parameterverdier (fx hydrauliske parametre for forskellige geologiske lag). Men der er også en betydelig usikkerhed på den geologiske model og hele den hydrogeologiske tolkningsmodel (Hansen and Gravesen, 1996).

Ideelt set burde usikkerhederne om den geologiske tolkning tages i betragtning. Det kan gøres ved at opstille et par alternative tolkningsmodeller baseret på forskellige forudsætninger. Disse alternative geologiske modeller kan herefter resultere i et tilsvarende antal forskellige numeriske modeller, som eksplicit kan indgå i en efterfølgende usikkerhedsanalyse (Kapitel 11).

4.9 REFERENCER

- Anderson, M.P. & Woessner, W.W. (1992) Applied Groundwater Modelling. Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.
- Hansen, M. & Gravesen, P. (1996) Geological modelling. In: *Abbott, M.B. and Refsgaard, J.C. (Eds): Distributed Hydrological Modelling*, 193-214, Kluwer Academic Publishers.
- Henriksen, H.J., Rasmussen, P. & Knudby, C. (1997) Afprøvning af zoneringsmetoder, Miljøstyrelsen. Foreløbigt tryk. GEUS 1997 (publiceres elektronisk af Miljøstyrelsen medio 2000)
- Refsgaard, J.C. & Storm, B. (1996) Construction, calibration and validation of hydrological models. In: *Abbott, M.B. and Refsgaard, J.C. (Eds): Distributed Hydrological Modelling*, 41-54, Kluwer Academic Publishers.

	Regional vandressourceopgørelse		Grundvandszoner		Lokal forureningsundersøgelse	
	Simple, indledende undersøgelser	Detailundersøgelser (projektering af vandindvinding, vandløbspåvirkninger)	Udpegning af sårbare områder	Indsatsplaner	Overslagsberegning	Detailberegning
Hvordan skal vandløb og søer repræsenteres ?	Medtages som stationære randbetingelser. Desuden skal vandføringsdata benyttes til at checke vandbalancen på oplandsskala	Medtages eksplicit – dynamisk simulering	Medtages som stationære randbetingelser	Medtages eksplicit, såfremt der er behov for en dynamisk simulering	Sjældent nødvendige	Medtages som stationære randbetingelser
Skal umættet zone medtages ?	JA, på en eller anden måde til estimering af aktuel fordampning	JA	NEJ	JA, til skøn af forureningstransport og adsorption/nedbrydning (fx nitrat og pesticider)	NEJ	Sjældent
Hvor kompleks skal den umættede zone beskrives ?	Gravitationsstrømning eller boksmodel	Richards' ligning nødvendig for områder med højt grundvandsspejl (fx ånære områder). Ellers er simple metoder ofte tilstrækkelig	-	Richards' ligning plus absorption-nedbrydning	-	I tilfælde hvor umættet zone beskrivelse er nødvendig vil der ofte kræves Richards' ligning plus absorption-nedbrydning
Preferentiel strømning i umættet zone ?	NEJ	Sjældent nødvendig – indgår i "effektive parametre"	-	Ja, til skøn af forureningstransport	-	JA, i de tilfælde hvor umættet zone model inkluderes
Hvor kompleks skal den mættede zone beskrives	2D ofte tilstrækkelig	Flerlags- eller fuld 3D beskrivelse med fokus på oplands/regional skala	Flerlags- eller fuld 3D beskrivelse med fokus på oplands-skala	Fuld 3D beskrivelse med fokus på lokal skala	2D eller flerlagsbeskrivelse ofte tilstrækkelig	Fuld 3D beskrivelse med fokus på lokal skala
Preferentiel strømning i mættet zone ?	NEJ	Som regel ikke nødvendig – indgår i "effektive parametre"	NEJ	JA, hvis der er tale om opsprækkede formationer	NEJ	JA, hvis der er tale om opsprækkede formationer
Densitet i mættet zone ?	NEJ	NEJ	NEJ	JA, i tilfælde hvor der er potentielle salinitetsproblemer	NEJ	JA, i tilfælde hvor der er potentielle salinitetsproblemer eller hvor forureningsperkolat kan "synke til bunds" pga høj densitet

Tabel 4.1 Typiske valg af kompleksitetsniveau for den hydrogeologiske tolkningsmodel

Kapitel 5 FRA HYDROGEOLOGISK TOLKNINGSMODEL TIL NUMERISK GRUNDEVANDSMODEL

Adam Brun

Afdeling for Grundvand, Affald og Mikrobiologi, DHI - Institut for Vand og Miljø

Nøglebegreber: Kode, præ- og postprocessering, procesbeskrivelse, numerisk net, numerisk model, fysisk model

ABSTRACT: Det er vigtigt at vælge en kode, der dels indeholder den ønskede beskrivelse af processerne, dels faciliterer en effektiv indlæggelse af data. Afhængigt af procesbeskrivelsen vil der være forskellige krav til informationstypen og -mængden samt til den valgte kode. Arbejdet med denne store datamængde kræver tilpassede værktøjer, såkaldte præ- og postprocessorer. En præprocessor automatiserer overgangen fra den hydrogeologiske tolkningsmodel til den numeriske model. Den numeriske model indeholder alle de informationer, der danner baggrund for en egentlig beregning af grundvandsstrømningen med en specifik kode.

5.1 VALG AF KODE

Ved valget af kode er der mange forskellige elementer, der spiller ind, og de vil vægtes forskelligt afhængigt af, hvem der inddrages i beslutningsprocessen. I delvist prioriteret rækkefølge kan følgende elementer inddrages:

- Procesbeskrivelsen, herunder mulige randbetingelser. Randbetingelser er sammenhængende med procesbeskrivelsen, idet nogle processer, eksempelvis udveksling med vandløb og op-pumpning, indbygges som randbetingelser.
- Mulighed for automatisk at indbygge hydrogeologiske egenskaber ud fra en rumlig opfattelse af hydrogeologien, et meget væsentligt element i præprocesseringen.
- Mulighed for invers modellering samt anden form for parameterestimering.
- Kvalitet af dokumentation, herunder verifikation af koden, manualer og lignende.
- Mulighed for erfaringsudveksling med andre brugere, support fra kodeudvikleren.
- Fremtidsudsigter for koden, herunder hvilken mulighed der er for at skifte til andre koder uden alt for stort tab af arbejdsindsats.
- Hvordan er den at arbejde med, hvordan er mulighederne for at automatisere trivielle opgaver, såsom opdatering af hydrogeologien, plotning af indvindingsoplande, mulighed for integration i GIS systemer osv.

I den følgende diskussion vil der blive refereret til forskelle koder. Der diskuteres kun koder, der er lavet til at blive distribueret bredt, dvs. som har en vis kompatibilitet med hjælpeprogrammer og generelle metodikker. Med kode menes der i denne sammenhæng et selvstændigt program, der umiddelbart kan afvikles på en normal computer uden installation af specielle programmer. Der nævnes forskellige koder undervejs, alle disse opsummeres i slutningen af dette kapitel.

5.1.1 Procesbeskrivelsen

Valget af kode hænger selvsagt meget sammen med den hydrogeologiske tolkningsmodel, der er valgt. Omvendt er det nødvendigt at skele til, hvilke koder der er tilgængelige i forbindelse med valget af hydrogeologisk tolkningsmodel. Typisk vil valget af en specifik kode medføre, at en del af det hydrologiske kredsløb beskrives meget detaljeret på bekostning af de andre dele i kredsløbet.

I forbindelse med arbejdet med zonerung er det i første omgang valgt at fokusere på en tredimensional beskrivelse af ikke-stationær grundvandsstrømning påvirket af umættet zone, grundvandsindvinding samt udveksling med vandløb. For at kunne arbejde med koden specifikt i forbindelse med zoneringsarbejdet er det ligeledes nødvendigt at kunne anvende resultatet fra strømningsberegningerne i en efterfølgende partikelbaneberegning.

Umættet zone

Samspejlet mellem umættet zone og grundvandszonen inkluderes typisk via en randbetingelse, der specificerer, hvor meget vand der strømmer ind i toppen af modellen. Denne vandbevægelse kaldes perkolation eller grundvandsdannelse. Ved at lade denne randbetingelse være tids- og stedsafhængig kan man simulere variationerne i grundvandsdannelsen. Ved denne simplificering mister man en dynamisk beskrivelse af, hvad der sker i den umættede zone over grundvandsspejlet. Valget af denne procesbeskrivelse vil derfor kræve, at den effektive perkolation bestemmes eksplicit ved hjælp af et andet værktøj. Disse værktøjer findes, eksempelvis DAISY, men er ikke diskuteret nærmere i dette dokument.

Stort set alle grundvandskoder inkluderer muligheden for en steds- og tidsvarierende strømning ind og ud af modeloverfladen. Der kan dog være begrænsninger i antallet af forskellige perkolationsområder, på den tidlige opløsning eller andet.

Hvis den umættede zone ønskes inkluderet dynamisk, indsnævrer feltet af tilgængelige koder sig. Koder, der inkluderer en fuld dynamisk kobling af umættet og mættet strømning med løsning af Richards ligning for umættet strømning horisontalt og vertikalt, vil typisk øge beregningstiden betragteligt, i nogle tilfælde til urealistiske værdier. Disse koder er derfor ikke så udbredt i forbindelse med oplandsskalamodellering.

Grundvandsindvinding:

Stort set alle koder har mulighed for at inkludere indvindinger. Dette gøres typisk ved at udtage et givent flow fra givne beregningsceller. Brugeren skal således selv afgøre den vertikale fordeling af indstrømningen til en boring, der vertikalt strækker sig over flere beregningsceller. Nogle koder eksempelvis MODFLOW-SURFACT99 har dog mere sofistikerede beskrivelser, der dels kan fordele indstrømningen fra de enkelte celler ud fra hydrauliske egenskaber og dels dynamisk kan justere indvindingsmængden som funktion af, hvor stor en del af filtret der ligger under vandspejlet.

Udveksling med vandløb

Den mest simple måde at inkludere vandløb i beregningerne er at tilføje bidraget til perkolation. Man skal således for hver beregningscelle, der på overfladen er overlejret af et vandløb, korrigere perkolationen, således at den tidsvarierende ind- og udstrømning til vandløbet medregnes. Denne metodik kræver, at man som udgangspunkt kender/fastsætter ind- og udstrømningen. En anden lidt mere sofistikeret metode tager udgangspunkt i, at man kender vandstanden i vandløbet. Principielt kan udveksling med et vanddækket område beskrives med vandspejlsforskellen mellem vandløbet og grundvandet ganget en lækagekoefficient. Mange koder har mulighed for at indbygge vandløb på denne måde. Der skal til disse koder opgives vandspejl til alle de celler, som er delvist overlejret af vandløbet. Dette kan være et forholdsvis tidskrævende arbejde at bestemme disse koter og lægge dem ind som tids- og stedsvariable værdier. Metoden sikrer, at vandet strømmer henholdsvis ind og ud af vandløbet afhængigt af grundvandsstanden. Der er dog ingen kontrol af vandmængden i vandløbet, og der kan således udstrømme mere vand fra vandløbet til grundvandet, end der er til rådighed. Der er yderligere en mere avanceret beskrivelse, hvor der tages hensyn til vandløbets flow, se kapitel 6. To koder, MIKE SHE og MODBRANCH, har ud over denne udvekslingsbeskrivelse mulighed for at inkludere en dynamisk beskrivelse af strømmingen i vandløbet, fuld koblet med grundvandsstrømningen.

Udveksling med dræn

Indstrømning til dræn inkluderes typisk som en modstandsfunktion, nogenlunde svarende til vandløbsbeskrivelsen. MIKE SHE har yderligere mulighed for at lede vandet fra dræne til vandløbet, hvis der i modellen er valgt en dynamisk beregning af vandløbsstrømningen.

5.1.2 Mulighed for partikelbanesimuleringer

Stort set alle koder har mulighed for partikelbanesimuleringer efterfølgende flowberegningen.

5.1.3 Mulighed for automatisk at indbygge hydrogeologiske egenskaber ud fra en rumlig opfattelse af hydrogeologien

I forbindelse med opsætningen af modellen er der to væsentlige beslutninger, der skal tages. Hvordan skal man diskretisere, altså opdele ens fysiske område i mindre delområder, såkaldte beregningsceller, og hvordan har man tænkt sig at indlægge de stedsvariable parametre i disse beregningsceller. Beregningscelleantallet kan let overstige 10.000, så det er derfor meget vigtigt, at koden har en god og brugbar måde at håndtere dette på. Den geologiske model vil typisk blive håndteret af andre værktøjer end selve grundvandskoden. I forbindelse med zoneringsarbejdet er det forventet, at der løbende skal opdateres på en geologiske model. Det er derfor vigtigt, at en sådan ændring kan gennemføres med en så lille indsats som muligt. Det er derfor nødvendigt, at koden samt de tilhørende præ- og postprocesseringsværktøjer understøtter en effektiv metodik til overførsel af den geologiske model til parameterværdier i de enkelte celler i den numeriske model. Denne præprocessering behandles separat i et senere afsnit.

5.1.4 Mulighed for invers modellering samt anden form for automatiseret parameterestimering

Ved fastlæggelse af eksempelvis den hydrauliske ledningsevne vil man typisk som udgangspunkt bestemme værdien ud fra den geologiske formation, som beregningscellen består af. Den aktuelle værdi indlægges så ud fra erfaringsværdier eller ud fra egentlige forsøg foretaget ved den pågældende lokalitet. Dette vil ikke nødvendigvis resultere i en tilfredsstillende fordeling af den hydrauliske ledningsevne, modellen vil ikke kunne repræsentere virkeligheden på en tilfredsstillende måde. Derfor vil man påbegynde at kalibrere modellen ved at justere på parameterværdierne og gentage simuleringen, dette gøres trinvis, indtil modellen accepteres. Denne trinvis fremgangsmåde kan automatiseres, dette kaldes for invers modellering. Denne automatisering kan dels lede til bedre resultater og dels spare tid.

5.1.5 Kvalitet af dokumentation, herunder verifikation af koden, manualer og lignende

En komplet beskrivelse af en kode inkluderer både en egentlig gennemgang af de ligninger samt tilhørende numeriske løsningsmetoder, der er valgt, og en brugervejledning. Det er vigtigt at gennemgå disse materialer på forhånd og vurdere, om det er muligt at anvende koden til det ønskede formål alene ud fra disse materialer. Denne dokumentation vil også give et vist indtryk af den organisation, der står bag koden. Det er vanskeligt at starte fra bunden uden gode eksempler på modelopsætninger, der ligner det, man selv skal i gang med. Mange koder inkluderer derfor testeksempler. En del af den nødvendige dokumentation af koden er beskrivelsen af, hvorledes den er verificeret. Denne verifikationsproces sikrer, at koden rent faktisk regner på det givne ligningssystem med de givne randbetingelser.

5.1.6 Mulighed for erfaringsudveksling med andre brugere, support fra kodeudvikleren

Alle koder vil på et eller andet tidspunkt medføre, at en bruger vil have problemer med at gennemskue, hvordan koden håndterer en specifik problemstilling, eller hvordan man kontrollerer mere specielle funktioner. Det er derfor vigtigt at kunne udveksle erfaringer med andre brugere af samme kode. Det kan derfor anbefales at vælge en kode, hvor der er et godt forum for erfaringsudveksling, hvori det også er muligt at inddrage udvikleren af koden.

5.1.7 Fremtidsudsigter for koden, herunder hvilken mulighed der er for at skifte til andre koder uden alt for stort tab af arbejdsindsats

Koder opdateres jævnligt, nogle koder udgår helt, og andre kommer til. Det er derfor vigtigt ikke at "låse" sig til en specifik kode. Dette kan sikres ved at vælge koder, hvor integration med andre koder og filformater er mulig. Dette vil også sikre, at man ikke spilder arbejdet, hvis man starter med en kode med en simpel procesbeskrivelse, og senere ønsker at skifte til en kode, der har flere faciliteter.

5.1.8 Hvordan er den at arbejde med, hvordan er mulighederne for at automatisere trivielle opgaver, såsom opdatering af hydrogeologien, plotning af indvindingsoplunde, mulighed for integration i GIS systemer osv.

Til sidst skal det nævnes, at valget af én specifik kode også delvist vil medføre valg af præ- og postprocesseringsmuligheder. Vælg en kode, der faciliterer en god integration med de bestående værktøjer, det vil i denne sammenhæng sige, styresystemer, grafiske værktøjer, regneark osv.

5.1.9 Udbuddet

Udbuddet af grundvandsmodeller er stort. Tabel 5.1 beskriver en overordnet inddeling af koderne ud fra deres kobling af grundvandsstrømning med umættet zone og vandløb.

Tabel 5.1 Beskrivelse af overordnede muligheder

Type	Beskrivelse	Kode
A.	Grundvandsstrømning, indvinding*, infiltration*, dræn*, vandløb*	MODFLOW, MODFLOW-SURFACT, FEFLOW, MIKE SHE samt mange andre
B1	Type A med fuld kobling til umættet zone	MODFLOW-SURFACT, FEFLOW, MIKE SHE**
B2	Type A med fuld kobling til vandløb	MODBRANCH, MIKE SHE
C	Type A med fuld kobling til vandløb, umættet zone samt overfladeafstrømning	MIKE SHE**

* Som randbetingelse uden tilbagekobling

** Kun vertikal umættet strømning

Type A:

MODFLOW er nok den mest udbredte grundvandskode. MODFLOW er udviklet af USGS og kan erhverves både som kørbar kode og som kildetekst. MODFLOW er i sin grundform en finit-differensmodel med en kerne, som består af en grundvandskode. Den er modulært opbygget, således at det er nemt (for erfarne modellører) selv at inkorporere forskellige faciliteter. Der er lavet mange præ- og postprocesseringsmoduler til MODFLOW. Gratis-versionen hedder i øjeblikket MODFLOW2000. Den har i august 2000 erstattet den tidligere version fra 1996, MODFLOW96. MODFLOW2000 har i forhold til MODFLOW96 flere muligheder for parameter estimation, sensitivitsanalyser samt stoftransport. MODFLOW2000 har ikke været anvendt så meget som MODFLOW96 endnu, og i det tilfælde, at denne anvendes kan det anbefales at være meget opmærksom på eventuelle meddelelser fra USGS. Der mange koder, der anvender algoritmerne i MODFLOW som basis. Et eksempel på dette er MODFLOW-SURFACT, der via supplerende moduler øger MODFLOW's virkeområde til også at omfatte umættet strømning, en sofistikeret brøndfunktion og andet. Typisk resulterer en sådan forøgelse i, at koden kun er kommercielt tilgængelig og kun i en kørbar version.

Type B1:

Disse koder har en fuld koblet beskrivelse af umættet zone og grundvandsstrømning. Tidsdynamikken i umættet zone er meget hurtig i forhold til grundvandet. Typisk vil tidsskridtene ændres fra dage til minutter, ligeledes vil det kræve en finere stedlig diskretisering. Disse forhold vil re-

sultere i, at beregningerne tager meget lang tid, alternativt at der regnes på et mindre geografisk område. Type B1 modeller er derfor ikke som sådan beregnet til modellering på oplandsskala. MIKE SHE simplificerer dog den umættede beskrivelse, således at umættet strømning kun foregår i vertikal retning. På trods af denne forsimpning er beregningstidsforøgelsen dog stadig betragtelig. Inklusionen af en kobling med umættet zone medfører typisk en mere følsom model, med større sandsynlighed for numeriske fejl (division med 0 og lignende), der resulterer i, at beregningen afbrydes.

Type B2:

Denne type inkluderer en fuld kobling mellem grundvandszonen og vandløbssystemet. Vandløbssystemet har en meget mere dynamisk beskrivelse med tidshorisonter på minutter. Denne type koder er dog ganske stabile, idet koblingen mellem grundvandet og vandløbene ikke er så direkte som ved umættet zone, hvor grundvandet så at sige kan stige op i den umættede zone. De fleste vandløbskoder har dog svært ved at håndtere en situation, hvor vandløbet tørrer ud. MIKE SHE og MODBRANCH synes at være de eneste koder, der håndterer denne kobling, MODFLOW-SURFACT annoncerer, at det inkluderes i deres MODFLOW-SURFACT2000 version.

Type C:

MIKE SHE er i øjeblikket den eneste model, der inkluderer en fuld kobling mellem grundvand, vandløb og umættet zone. MIKE SHE er udviklet til modellering af hydrologi på oplandsskala, og den umættede zonebeskrivelse er derfor simplificeret for at undgå alt for lange beregningstider.

Prisen på en grundvandskode samt forskellige præ- og postprocesseringsværktøjer varierer meget, fra ingenting til DKK 40-50.000. Udgiften til koden er en meget begrænset del af den samlede udgift til zoneringsarbejdet og vil derfor ikke blive diskuteret nærmere (Se prisliste i afsnit om præ- og postprocessering).

5.2 VERIFICERING AF KODE

For de kommercielt tilgængelige koder gælder det, at der er gennemført verificeringskørsler. Disse er typisk afrapporteret i de medfølgende manualer. Generelt må det forventes, at ovennævnte koder er godt verificeret, det kan dog være en fordel løbende at holde øje med rapporter om fejl og uhensigtsmæssigheder. Disse kan typisk findes på hjemmesider på internettet. De fleste koder forhandles af mange forskellige udbydere, det kan være en fordel at finde frem til det sted, hvor koden er udviklet. Typisk vil der på dette sted kunne findes den bedste og mest opdaterede information om den specifikke kode.

5.3 PRÆPROCESSERING - OVERFØRSEL AF HYDROGEOLOGISKE PARAMETRE TIL MODELLEN

Når man arbejder med grundvandskoder og geologiske modeller, vil man typisk konstruere sin geologiske model i lag og linser ud fra informationer fra lagfølgeboringer, geofysiske undersøgelser og andet. Lag er i modelområdet kontinuerte geologiske enheder, der principielt består af den samme geologiske enhed. Linser er inden for modelområdet, diskontinuerte delområder. Disse kan gå på tværs af laggrænser, men har altså ikke en tilsvarende horisontal udbredelse.

Lag defineres ud fra en top- og en bundflade, der kan variere i stedet, således at laget kan have varierende tykkelse. I de fleste tilfælde skal lagene have en vis minimumstykkelse, 1-5 cm, for ikke at forvirre en automatiseret overførsel af informationer fra den geologiske model til grundvandsmodellen. Linser har tilsvarende en top og bund, men er yderligere defineret ud fra en horisontal udstrækning. Denne samling af lag og linser kaldes her den fysiske model. Typisk dannes den fysiske model ud fra optegning af geologiske tværsnit, se figur 1, øverst.

Der findes koder til denne proces, et dansk produkt GeoEditor kan således direkte fra boringsdatabasen ZEUS (og den kommende Jupiter) opstille fysiske modeller. Enkelte præprocessorer

til specifikke koder har også denne funktionalitet. GMS og Visual Groundwater er eksempler på sådanne processorer. I andre koder, ex. Groundwater Vistas, kan den geologiske model importeres i form af "zoner" omfattende beregningslag, rumlig fordeling af hydrauliske parametre og andet, fra eksempelvis GIS-programmet ArcView.

For at kunne opstille en numerisk model kombineres den fysiske model med en overflademodel, se figur 5.1, nummer to fra toppen. Overflademodellen indeholder information om, hvordan den umættede zone, vandløb, indvindingsboringer med mere skal inkluderes. Ved en modelberegning er det nødvendigt at opdele den fysiske model i mindre enheder, såkaldte beregningsceller. Denne model kaldes her den numeriske model. Hver beregningscelle skal tilføres information om de hydrogeologiske egenskaber. Overflademodellen og den fysiske model danner grundlag for opstilling af den numeriske model. To metodikker anvendes typisk, den konceptuelle metode og gridmetoden.

Den konceptuelle metode inkluderer en automatiseret generering af den numeriske model ud fra den fysiske model. Der tages således hensyn til den fysiske models opdeling af modellen i geologiske enheder.

Alternativet er den gridbaserede metode. Her opstiller man først sine beregningslag for dernæst at indbygge de hydrogeologiske parametre i selve beregningscellerne. Denne metodik er faciliteret af stort set alle koder. Der er hjælpeværktøjer til at lade beregningslagene følge de geologiske laggrænser, indbygge linser osv. Processen kan sammenlignes lidt med at tegne af med et kalkeringssparpir lagt oven på den fysiske model. Det uheldige ved denne model er, at det er mere tidskrævende at ændre på geologien, samt at man jo faktisk skal holde to individuelle datasæt opdateret, ændringer i den fysiske model skal jo inkluderes løbende i den numeriske model.

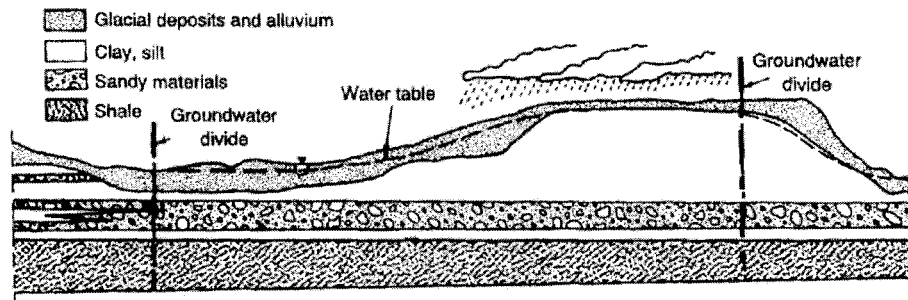
At komme fra disse lag og linser via en diskretisering af modelområdet gøres meget kodespecifikt. Der er få programmer, som er mere generelle, MODGIS eksempelvis. Men de er meget præget af at være udviklingsversioner, og det er derfor svært at overskue, hvorledes disse umiddelbart kan anvendes. MODGIS er eksempelvis kun lavet til UNIX versionen af ARC/INFO. GeoEditor er et dansk produkt, der er beregnet til at generere geologiske modeller. Programmet genererer information om lag og linser på en måde, der faciliterer indbygning i grundvandsmodeller.

Gridmetodikken anvendes mere eller mindre elegant af de forskellige koder. Stort set alle måder at lave sin diskretisering på i 3 dimensioner består af en beskrivelse af beregningslagenes top og bund samt en horisontal diskretisering, fælles for alle beregningslag. Typisk vil man ved denne metode lave sit numeriske net, således at beregningslagene er afgrænset tilsvarende de geologiske lag, eventuelt med flere beregningslag inden for det samme geologiske lag. På den måde kan de enkelte beregningslag hurtigt tildeles værdier svarende til, hvilket geologisk lag de ligger i. Linser er lidt mere arbejdskrævende at lægge ind, dette gøres typisk ved at identificere, hvilke beregningslag de er til stede i, og dernæst ud fra deres horisontale udstrækning af korrigerede standardværdierne tildelt beregningslaget. Denne metodik er mere eller mindre elegant faciliteret i stort set alle præprocessorer. FEFLOW, MIKE SHE samt MODFLOW-præprocessorerne Groundwater-Vistas og GMS er eksempler på sådanne programmer.

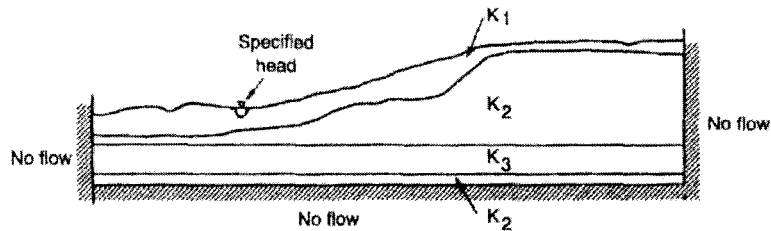
I enkelte af præprocessorerne er det muligt at specificere hydrogeologiske enheder, hvor hver enhed indeholder information om alle relevante hydrogeologiske parametre. Den rumlige fordeling af parameterværdierne foretages ved at angive, hvorledes enhederne er distribueret i beregningscellerne. Parameterværdierne for de enkelte celler bestemmes dernæst automatisk ud fra den angivne jordtypes specifikke parametre. MIKE SHE, VisualModflow og GMS har denne funktionalitet.

Den konceptuelle metode svarer til denne metode, man har blot automatiseret indlægningen af enhederne i beregningscellerne. GMS, ArgusOne og MIKE SHE anvender denne metodik og har som inddata beskrivelsen af udstrækningen af de geologiske enheder (lag og linser) i form af flader og horisontale afskæringer af linser, beskrivelse af parameterværdier for de enkelte geologiske enheder. Efter valg af diskretisering indlægger koderne automatisk værdier i de enkelte beregningsceller. Denne metodik gør det nemt at ændre på sine geologiske informationer.

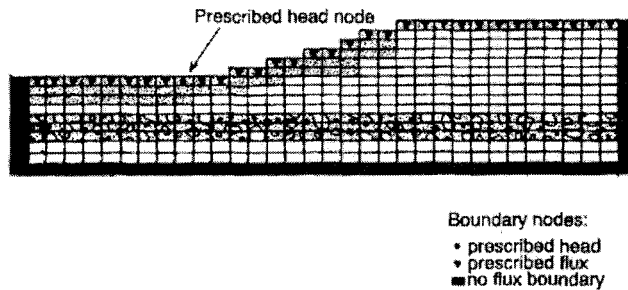
UNDERSTANDING THE NATURAL SYSTEM



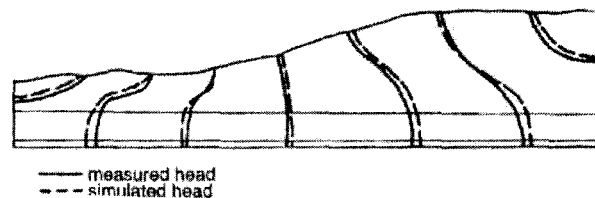
CONCEPTUALIZING THE NATURAL SYSTEM



SELECTING THE NUMERICAL MODEL



APPLYING THE MODEL



Figur 5.1 Faser ved opstilling af grundvandskode for beregning af specifik problemstilling. Øverst formuleres den hydrogeologiske tolkningsmodel, derefter reduceres modellen til de mest betydende processer og fysiske opdelinger af systemet, dernæst indsættes den konceptuelle model i en specifik kode og danner dermed selve modellen (nederst).

I nedenstående tabel 5.2 er et udvalg af præprocessorer beskrevet, de understøtter alle partikelbanesimuleringer (dog ikke ArgusOne).

Tabel 5.2. Opsummering af udvalgte præprocessorer

Navn	Egenskaber	Grundvandskode
MIKE SHE	Fuldt automatiseret håndtering af lag og linser (via GeoEditor), alternativt 2D horisontalt baseret gridredigering af individuelle beregningslag.	MIKE SHE
GMS	Fuldt automatiseret, det er svært at gennemskue ud fra dokumentationen, hvorvidt linser også er automatisk indbygget. Alternativt 3D baseret grideditor. Nogen mulighed for invers modellering.	MODFLOW-96 grundvandskode. Alternativt kan MODFLOW-SURFACT anvendes (oplyst af MODFLOW-SURFACT producent).
Visual Modflow	Gridmetode, dog med muligheder for at tildele en beregningscelle en jordtype. Mulighed for invers modellering.	MODFLOW-96
Groundwater-Vistas/MS-VMS	Gridmetode med 2D baseret editor (3D med MS-VMS), jordtyper som mulighed. Mulighed for invers modellering.	Er beregnet til MODFLOW-SURFACT, men kan også anvende MODFLOW96 og MODFLOWWIN32.
FEFLOW	Skiller sig ud, fordi det er en finit elementkode, beregningscellerne behøver således ikke at være "skoæsker". Der er mulighed for i meget større omfang at diskretisere finere i delområder, end ved finit differenskoder. FEFLOW er en mellemting mellem en konceptuel metode og en gridmetode.	FEFLOW
ArgusOne	Fuldt automatiseret, udviklet til MODFLOW, men kan genere data både til finit differens og finit elementkoder. ArgusOne virker som en meget kvalificeret geologisk editor, den understøtter ikke en partikeltransportkode.	FEFLOW, FEMWATER, MODFLOW96, MODFLOW2000 samt via makro script mange andre.

Anbefalinger:

Ovenstående gennemgang baseret på den umiddelbart tilgængelige information om forskellige præprocessorer giver anledning til følgende anbefalinger:

MS-VMS kan vælges, hvis der ønskes anvendt MODFLOW-SURFACT eller MODFLOW-WIN32 som grundvandskode. Denne kode understøtter automatisk fordeling af egenskaber ud fra stokastiske parametre. Det er således muligt at gennemføre et antal, ex. 100, simuleringer med forskellige fordeling af den hydrauliske ledningsevne, alle 100 simuleringer gennemføres med efterfølgende partikelbane beregning. Til sidst kan resultatet af alle simuleringerne plottes op på forskellige måder for at belyse variationer i resultatet som funktion af den givne variation i parameterværdierne.

GMS, hvis der ønskes anvendt MODFLOW96 eller MODFLOW-SURFACT som grundvandskode. GMS har mulighed for "solid modelling" en metode der kan beregnes 3D rumlig udbredelse af geologiske formationer.

MIKE SHE, hvis der ønskes koblet grundvand med umættet zone og vandløb.

Både GMS og MIKE SHE (via Geoeditor) kan håndtere den geologiske model samt automatisk overførsel fra den geologiske model til det numeriske net. Information om MS-VMS og GMS kan findes på internetadressen www.scisoftware.com, MIKE SHE kan findes på www.dhisoftware.com/mikeshe. Prisen på produkterne ligger i intervallet 10.000 til 40.000 kr. for en pakke, der inde-

holder både selve beregningsmodulerne og præprocessorerne. Typisk vil de koder med flest muligheder for koblede processer og flot grafik være dyrest. For mange koders vedkommende er det muligt at få speciel rabat hvis koden kun skal anvendes i begrænset omfang. Alle præprocessorer kan arbejde sammen med GIS. Dette gøres mere eller mindre elegant dels afhængigt af præprocessoren og del afhængigt af GIS-systemet. Det er ikke muligt ud fra "reklame" beskrivelserne at vurdere præcist deres GIS-funktionalitet. Dette gøres bedst ved at teste kode mod det pågældende GIS-system. De fleste af koderne kan erhverves i en testperiode mod et mindre beløb, så de direkte udgifter ved en sådan test ikke er så store. Det anbefales under alle omstændigheder at afprøve "demo" versioner, før en endelig beslutning tages. Der kan være en forskel mellem den reklamerede og den reelle funktionalitet af programkoden.

5.4 BESKRIVELSE AF DATABASEHOVET I FORHOLD TIL VALGTE MODEL OG INKLUDEREDE PROCESBESKRIVELSER

Generelt for koderne og deres mulige procesbeskrivelse er, at de er i stand til at udnytte den datamængde og -type, der typisk er til rådighed. Ved en opsætning af en tre-dimensionel grundvandsmodel vil informationer om eksempelvis hydraulisk ledningsevne skulle angives for hver enkelt celle, teoretisk er der altså mulighed for at opgive disse informationer i en stedlig skala svarende til cellestørrelsen. Typisk vil de direkte informationerne om hydraulisk ledningsevne været angivet for en pumpetest foretaget i en enkelt boring. Denne information vil man så ekstrapolere til at være dækkende for et helt geologisk lag, eller et delområde langt i udstrækning langt overstigende influensradius for pumpetesten. Tilsvarende kan modellen håndtere en tidlig opløsning på helt ned til time niveau, hvor potentiale data typisk findes som månedsværdier. I det tilfælde at man opererede med en trykniveau randbetingelse ville man så ekstrapolere den målte månedlige værdi til at være gældende for hele perioden. For at anvende målte data i modeller er det altså i mange tilfælde nødvendigt at interpolere i tid og sted for at skaffe fornøden information til modellen.

Jo mere sofistikeret en procesbeskrivelse, der vælges i den konceptuelle model, jo flere data eller parametre vil der typisk være behov for at specificere. Dette kan give sig udtryk i enten at der skal angives en finere variation i en enkelt parameter værdi, eller at procesformuleringen vil forøge antallet af parametre der skal beskrives. Ved et valg af en geologisk model med 5 lag i stedet for 3 vil det eksempelvis være nødvendigt at specificere udstrækningen af flere lag, samt eventuelt også andre hydrogeologiske parameter værdier. Ved valg af en konceptuel model der inkluderer en beskrivelse af den umættede zone vil parameter mængden øges til også at inkludere parameter værdier for umættet zone strømning.

I nedenstående tabel 5.3 er det voksende behov for data og parametre, der efterfølger valget af en mere kompleks procesbeskrivelse, forsøgt anskueliggjort. Tabellen er ikke endelig, der er for mange af processernes vedkommende en mere nuanceret overgang fra en simpel til avanceret beskrivelse.

Hvilken procesbeskrivelse der vælges, simpel eller avanceret, vil altså til dels afhænge af de informationer, der er til rådighed. Typisk er der ikke data til de mere avancerede procesbeskrivelser, og anvendelse af en simpel procesbeskrivelse synes ligefrem. Der er dog et tredje alternativ, at anvende en avanceret beskrivelse med en simplificering af parameter værdierne. Et eksempel kunne være vandløb. Vandløb kan simuleres simpelt ved at beskrive variationen i vandspejlet i den enkelte celle, hvor vandløbet er beliggende, samt tildele en lækagekoefficient. Denne beskrivelse kræver, at man meget nøje kontrollerer, om vandbalancen overholdes for den enkelte vandløbsstrækning.

Tabel 5.3 Eksemplificering af databehov ved skift fra simpel til avanceret procesbeskrivelse

Type	Beskrivelse	
	Simpel	Avanceret
Grundvandszonen	Rumlige fordeling af hydraulisk ledningsevne, magasintal, trykniveau, placering samt tidslig variation i indvindinger	+ sprækkegeometri, lagorientering, principiel retning af hydraulisk ledningsevne
Umættet zone	Fordeling i tid og sted af perkolation, evt. beregnet med rodzonemodel	+ rumlig fordeling af umættede hydrauliske egenskaber, planteinteraktion (rodtybde, vandoptag), overfladeruhed, nedbør, evaporation (afledt af en yderligere række parametre og variable), makroporer
Dræn	Horisontal og vertikal placering, modstandskoefficient	+ routning
Søer	Vandspejl, horisontal udstrækning, lækagekoefficient	+ geometri, til- og afløbsmængder, tidsvarierende fordampning
Vandløb	Vandspejl, horisontal placering, lækagekoefficient	+ vandløbstværsnit, afgrødevariationer, flowmålinger

Der må jo ikke infiltrere mere vand, end der fysisk er til rådighed. Altså vil en simpel beskrivelse medføre en del kalibrering samt kontrol af data. Ved at vælge en mere avanceret beskrivelse (med simple antagelser om vandløbstværsnitsudformninger) vil modellen holde øje med vandbalancen samt beregne variationer i vandstanden. Desuden vil modellen give indtryk af den interne vandtransport, der er mellem delområder i oplandet. I mange tilfælde vil den sidste metode give flere informationer og skabe en bedre ramme for at vurdere resultaternes validitet.

Hvilken procesbeskrivelse der anvendes, må afvejes i det enkelte tilfælde. Også koden spiller ind her, MIKE SHE kan ex. kun håndtere dræn i øverste beregningslag, hvor andre koder er mere fleksible.

5.5 REFERENCER

- Anderson, M.P. and W.W. Woessner (1992): Applied Groundwater Modelling. Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.
- Hansen, S., Jensen, H. E., Nielsen, N.E. & Svendsen, H. (1990). Daisy – soil plantatmosphere system model. Technical Report A10, Miljøstyrelsen.
- www.scisoftware.com, et indkøbssted for mange grundvandsmodeller
- www.hgl.com, udvikleren af MODFLOW-SURFACT
- www.usgs.gov, udvikleren af MODFLOW
- www.dhi.dk, udvikleren af MIKE SHE

Kapitel 6 FASTLÆGGELSE AF RANDBETINGELSER

Adam Brun

Afdeling for Grundvand, Affald og Mikrobiologi, DHI - Institut for Vand og Miljø

Nøglebegreber: Randbetingelser, stationær, ikke-stationær, fastholdt tryk, flux, indvinding.

ABSTRACT: En numerisk model er en geografisk afgrænset beskrivelse af hvad der sker i selve modelområdet, hvorledes omgivelserne påvirkes af modellen beregnes ikke. Ligeledes vil omgivelsernes påvirkning af modellen ikke blive beregnet dynamisk, dette skal specificeres i form af såkaldte randbetingelser. Randbetingelser beskriver, hvorledes denne geografisk afgrænsede numeriske model vil blive påvirket af omgivelserne. Disse skal være kendte i hele beregningsperioden og kan være baseret på målte værdier eller forudsætninger om flow over randen evt. som funktion af beregnede værdier internt i den numeriske model. Uagtet valget af randbetingelsestype vil randbetingelserne være meget afgørende for beregningsresultatet. Valget og parameteriseringen af randbetingelserne bør derfor indgå som en væsentlig faktor ved opstilling af modellen.

6.1 RANDBETINGELSESTYPER

Randbetingelser er på baggrund af deres matematiske formulering inddelt i tre katagorier, se Figur 6.1 for illustration af de forskellige typer.

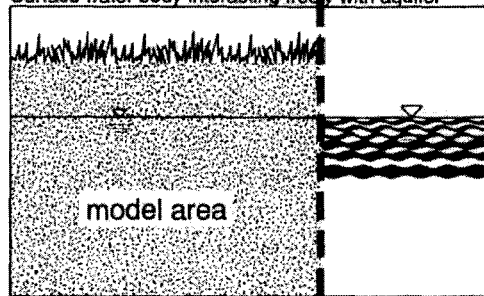
- Fastholdt tryk, en lidt misvisende titel idet denne randbetingelse kan variere i tiden og stedet. På engelsk hedder denne type prescribed head, first kind eller Dirichlet condition. Denne type randbetingelse er nemmest for modellen at løse i det den jo angiver variabel værdien direkte, omvendt er den også den der "låser" modellen mest.
- Flux, denne type randbetingelse fastholder et givent flux ind/ud over et randpunkt. På engelsk, prescribed flux, second kind, eller Neumann condition. Denne type randbetingelse er ikke så nem at løse i det den ikke låser tryk-værdien på randen fast.
- Tryk afhængig flux, denne er mere avanceret i det denne randbetingelse angiver hvorledes fluxen over randen afhænger af tryk gradienten. På engelsk kaldes den semipermeable, third kind eller Cauchy.

6.1.1 Betydning af valget af randbetingelser

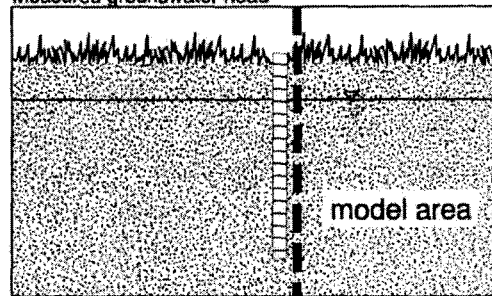
Det skal på alle ydre rander af den numeriske model være beskrevet, hvorledes disse reagerer i forhold til omverdenen. Dette kaldes randbetingelser. Randbetingelser opdeles typisk i indre og ydre randbetingelser. Det er ikke en stringent opdeling, men man vil typisk kategorisere de overordnede randbetingelser på fladerne som ydre randbetingelser og de øvrige randbetingelser, indvinding, vandløb og dræn, som indre randbetingelser. I denne sammenhæng er det valgt at betegne infiltration også som indre randbetingelse. Den matematiske nødvendighed af randbetingelser samt hvilke typer af randbetingelser der grundlæggende er til rådighed diskuteres i Kapitel 1.

PRESCRIBED HEAD OR FIRST KIND OR DIRICHLET'S CONDITION

Surface water body interacting freely with aquifer

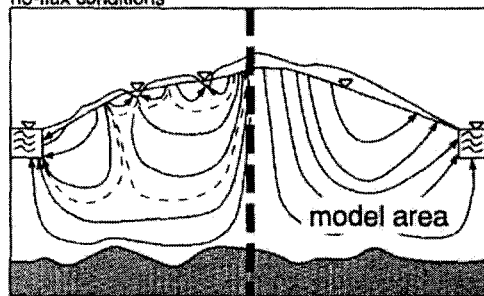


Measured groundwater head

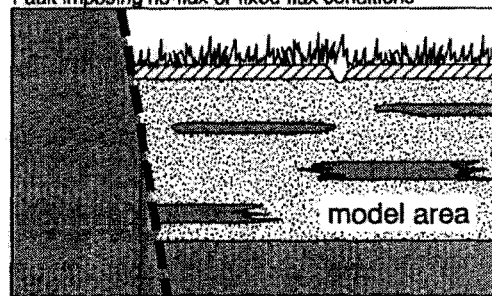


PRESCRIBED FLUX OR SECOND KIND OR NEUMANN'S CONDITION

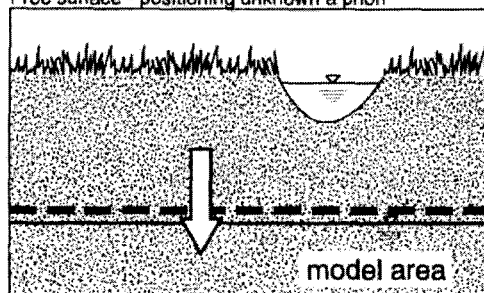
Groundwater divide or streamlines imposing no-flux conditions



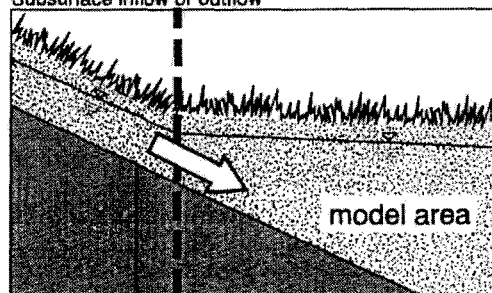
Fault imposing no-flux or fixed flux conditions



Free surface - positioning unknown a priori

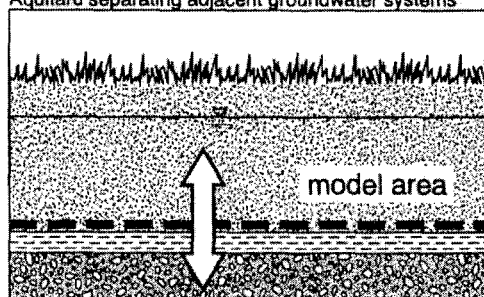


Subsurface inflow or outflow

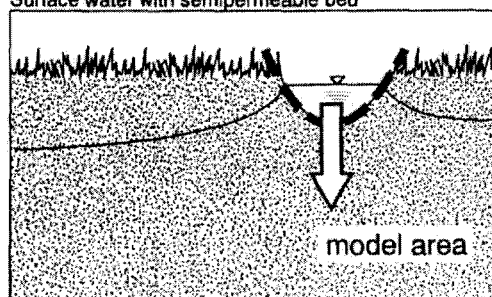


SEMI-PERMEABLE OR THIRD KIND OR CAUCHY'S CONDITION

Aquitard separating adjacent groundwater systems



Surface water with semipermeable bed



--- model boundary

Figur 6.1 Flow randbetingelsestyper.

Typisk, men ikke nødvendigvis, vil man på en given flade have den samme type randbetingelse. På modellens sider kan man alternativt specificere trykket, trykgradienten eller vandstrømningen ud af/ind i de enkelte beregningsceller placeret på randen. I det tilfælde, man ønsker impermeable sider, vil man benytte den sidste option og så specificere, at vandstrømningerne er lig 0. I bunden vil man typisk vælge at specificere vandstrømningen (evt. lig 0). Toppen af modelområdet vil typisk byde på en blanding af randbetingelser, idet der dels ønskes tilført infiltration og dels ønskes inddraget udveksling med vandløb og dræn.

Afhængigt af modellens udformning vil disse randbetingelser spille forskelligt ind på beregningsresultaterne. Et eksempel kan være, at man ønsker at modellere på et helt grundvandsoplend. Her vil man vælge at have impermeable sider og bund. Vandbalancen vil således være helt styret af infiltration, oppumpning og vandløbsafstrømning. I dette tilfælde vil de mest betydende randbetingelser være infiltrationen og vandløbsafstrømningen. Disse to vil fuldstændigt kontrollere magasineringen af grundvand og dermed placeringen af grundvandsspejlet. Et andet eksempel kunne være, at man ønsker at bestemme grundvandsstrømningshastigheden og retningen under et deponi. I dette tilfælde vil man typisk vælge at lade modellens rande følge den overordnede strømningsretning. På de rande, der ligger i strømningsretningen, vil man specificere en 0-strømnings randbetingelse, og på randene opstrøms henholdsvis nedstrøms vil man specificere trykniveauet alternativt flowet, evt. med dets variationer i tiden. Her vil specificationen af op- og nedstrøms rande samt no-flow rand være afgørende. På trods af, at der infiltrerer en del vand fra overfladen, vil strømningen være mest kontrolleret af det overordnede strømningsmønster, der ligger direkte indbygget i randene. I begge tilfælde er randbetingelserne overordnet styrende for beregningerne. Dette er gældende dels for de randbetingelser, der er baseret på målinger, altså tryk og infiltrationsrande, og dels for de rande, der er baseret på en forudsætning om 0-strømning.

Det er vigtigt at understrege at valget af randbetingelser vil have en meget afgørende indflydelse på modellen og dermed de resultater der beregnes. I det tilfælde at randbetingelserne er overstyrrende vil modellen helt miste sin interne dynamik og dermed sin berettigelse.

6.1.2 Konstante kontra tidsvarierende randbetingelser

I ikke-stationære simuleringer er der mulighed for at indbygge tidsvarierende randbetingelser. Som det fremgår af ovenstående, er randbetingelserne altafgørende for beregningsresultatet. Det er derfor vigtigt at fastsætte deres værdi og beliggenhed i forhold til formålet med modelarbejdet.

I det tilfælde, hvor der vælges tidskonstante randbetingelser, er det vigtigt, at de valgte værdier repræsenterer hele den periode, der ønskes regnet på. Dette er gældende både for ikke-stationære og stationære simuleringer. En stationær beregning repræsenterer som sådan ikke et øjebliksbillede, men snarere en gennemsnitlig tilstand i en periode, hvor forholdene tilnærmelsesvis er uforandrede. Ved en ikke-stationær modellering af et grundvandsoplend vil infiltrationen og indvindingerne typisk indbygges som tidsvarierende. På den måde kan man få et overordnet indtryk af vandbalancen i oplandet samt af grundvandsspejlets placering i våde og tørre år. Hvis der arbejdes med trykniveau randbetingelser, kan det være en fordel at indbygge disse som tidsvarierende rande. På denne måde kan man indbygge, hvordan omverdenen har influeret på modellen i beregningsperioden.

6.2 IMPLEMENTERING AF YDRE RANDBETINGELSER

Typiske randbetingelser på de ydre rande vil være, kendt trykniveau, kendt gradient (eller flow), eller flow beregning på baggrund af en lækage koefficient.

I tilfælde af, at der modelleres på et helt grundvandsoplend, vil man typisk starte med at fastlægge grundvandsskellet for oplandet. Dette gøres bedst ud fra trykniveauobservationer. Eventuelt anvendes topografiske data supplerende ud fra en forudsætning om sammenfald mellem topografisk oplend og grundvandsoplend. Grundvandsskellets placering vil afgrænse modelområdet horisontalt. På siderne af modellen vil man antage en stationær 0-flux. Den ændring i magasinering

af grundvand, der måtte ske som følge af, at oplandet ændrer horisontal udstrækning som funktion af ændringer i grundvandsstanden, vil således ikke kunne modelleres.

Ved modellering af delområder (lokal model) i et vandløbs opland er der mulighed for, hvis man har en modelopsætning af hele oplandet (regional model), at udtrække tidsvarierende indre beregningsværdier, typisk trykniveauer fra den regionale model, svarende til placeringen af de ydre rande i den lokale model, se figur 7.2. Hvis der ikke er modelleret, må randbetingelserne bestemmes ud fra målte værdier. Ved anvendelse af målinger er det nødvendigt at interpolere, således at der kan tilskrives værdier i hvert enkelt beregningspunkt på randen. Dette kan være vanskeligt. Specielt den vertikale trykvariation er i de fleste tilfælde meget dårligt bestemt. Generelt vil man derfor altid forsøge at placere sin modelrand, således at den passer bedst med de forudsætninger, man indbygger med formuleringen af sin randbetingelse.

Bunden af et grundvandsmagasin vil typisk defineres som bunden af det nederste vandførende lag der indgår i ferskvandsflowet. Dette kan være vanskeligt at bestemme, eksempelvis vil man for kalk forudsætte, at magasinets vandførende lag er repræsenteret af de øverste 5-10 meter (evt. dybere), hvor kalken er opsprækket. Under dette vil den hydrauliske ledningsevne være så lav, at der kan forudsættes impermeabel bund. Her defineres lagets mægtighed altså ikke ud fra den geologiske struktur, men i stedet ud fra dets vandføringsegenskaber.

Såfremt bunden ikke kan forudsættes impermeabel, antages enten et kendt flux eller en lækagekoefficient. Lækagekoefficienten beskriver udstrømningen gennem bunden af modellen som funktion af trykniveauet i den nederste beregningscelle. Fastsættelse af lækagekoefficienten kan gøres ud fra de hydrauliske egenskaber for det geologiske lag, der ligger umiddelbart under modelområdet eller alternativt iterativt, således at der opnås en ønsket vandstrømning gennem bunden.

6.3 IMPLEMENTERING AF INDRE RANDBETINGELSER (INFILTRATION/GRUNDEVANDSDANNELSE, VANDLØB, DRÆN SØER/OVERFLADISK AFSTRØMNING, OPPUMPNINGER)

6.3.1 Infiltration

Infiltration beskriver den mængde vand, der strømmer fra jordoverfladen og ned i jorden. Den del, der når frem til det øverste grundvand, kaldes perkolation, eller grundvandsdannelse. Med denne definition kan perkolation også have en negativ værdi, nemlig i de tilfælde, hvor jorden over grundvandsspejlet bliver så udtørret, at den begynder at trække vand op via kapillærkræfter. Der er en lang række processer, der spiller ind, når man skal opstille en komplet konceptuel model for infiltration og perkolation. Typisk kræves der en række parametre, der sammenlignet med grundvandsmodellering varierer i meget lille skala både tidsligt og rumligt. Typisk vil disse parametre ikke være kendt på oplandsskala. I de fleste tilfælde vil man derfor vælge at frakoble processerne, altså ikke inddrage det faktum, at grundvandsspejlets bevægelse dynamisk vil ændre dybden af den umættede zone. Ved at forudsætte dette er det muligt på forhånd at bestemme perkolationen ved hjælp af modeller specielt udviklet til at beskrive vandbevægelsen over grundvandsspejlet. Typisk skal der angives arealanvendelse, nedbør samt afstand fra jordoverfladen til grundvandsspejlet som et minimum. Et eksempel på en sådan model er en dansk udviklet kode DAISY. DAISY er anvendt i forskellige sammenhænge, og der er efterhånden opbygget et stort erfaringsmateriale om perkolationsstørrelser i Danmark. Disse erfaringsværdier er tilgængelige i eksempelvis kvadratnettet, hvor det er muligt at se en forventet perkolation på forskellige lokaliteter i Danmark. I mange tilfælde anvendes disse erfaringsværdier direkte uden en decideret rekalkulation baseret på det specifikke modelområde. Som et minimum bør denne fremgangsmetode diskuteres og konsekvenserne heraf belyses i den endelige rapportering. Et eksempel på et stort modelarbejde, hvor der anvendes en integreret hydrologisk model, er DK-modellen. DK-modellen beskriver hele Danmark og forventes at kunne danne basis for etablering af overordnede randbetingelser for oplande til vandløbssystemer. Der er koder, hvor vandbevægelsen over grundvandsspejlet beregnes dynamisk, se kapitel 5.

6.3.2 Vandløb

Konceptuelt er der tre metoder til at beskrive vandudvekslingen mellem vandløb og grundvand. Alle forudsætter, at vandudvekslingen er lineært sammenhængende med vandstandsforskellen mellem grundvand og vandløbet. Forskellen ligger i, hvorledes vandstanden i vandløbet er bestemt.

Metode 1) I de beregningsceller, der indeholder vandløbssegmenter, angives vandstanden i vandløbet, eventuelt tidsvarierende.

Metode 2) Samme som 1), dog er basisvandstrømningen i vandløbet angivet, og det sikres, at tilstrømningen til grundvandet ikke overstiger den mængde, der strømmer i vandløbet. Med denne metode er det desuden muligt ved at opgive vandløbskarakteristika at lade modellen beregne vandstanden. Denne metode er indbygget i de fleste MODFLOW-varianter.

Metode 3) Denne metode beregner vandløbsstrømningen dynamisk. Vandet ledes således gennem vandløbets forskellige segmenter. Denne fulde kobling mellem vandløb og grundvandsstrømning er ikke sædvanlig, og der er et begrænset udvalg af koder, der har denne mulighed indbygget. Denne metode vil kræve detaljerede informationer om vandløbenes karakteristika samt yderligere data om vandføring og/eller vandstande, idet denne model tilsvarende grundvandskoderne kræver initialbetingelser, randbetingelser osv. Et vandløb vil reagere langt hurtigere på forandringer end grundvandsstrømningen, så typisk vil man køre de to modeller i hver sin tidsskala (minutter for vandløbet og måske dage for grundvandsstrømningen), og så opdatere vandfluxen mellem de to systemer med passende tidsrum.

Uanset hvilken metode der vælges er det vigtigt at lækagekoefficienterne får den rigtige værdi, således at den geografiske fordeling af vandløbstilstrømningen beregnes korrekt.

6.3.3 Dræn

Dræn indlægges i de fleste koder tilsvarende vandløb dog med den undtagelse, at der kun tillades tilstrømning til drænet. Vandet fra drænet føres ud af modellen. Kun i enkelte koder er det muligt at rute drænvandet til vandløbet, hvilket kræver, at vandløbet beregnes dynamisk.

6.3.4 Søer, damme og overfladeafstrømning

Søer og damme kan indlægges i modellen som:

Metode a) Trykrande på overfladen af modelområdet. Trykværdien på overfladen vil variere tilsvarende vandspejlet på søen. Ved anvendelse af denne metodik kan det eventuelt være nødvendigt at justere på permeabiliteten af den øverste beregningslag for at sikre, at der opnås den ønskede vandudveksling.

Metode b) Tilsvarende vandløb, hvor der dog tages hensyn til vandbalancen for søen. Denne metodik er velegnet til vandhuller, der periodisk tørrer ud.

Metode c) En dynamisk beregning af overfladeafstrømning. Denne metodik vil, når grundvandspejlet stiger over terræn, beregne, hvorledes dette vand vil strømme på overfladen ud fra topografien. På den måde dannes der søer i de topografiske dale, der er indlagt i modellen, når grundvandspejlet overstiger terræn, i dette tilfælde søbunden.

Arbejder man med vandudveksling mellem grundvand og søer med større udstrækning er det vigtigt at fastsætte lækage koefficienterne, således at geometrien i systemet beskrives korrekt.

6.3.5 Oppumpninger

Oppumpninger beregnes altid ved at specificere indvindingsmængderne som funktion af tiden. En boring angives ved en X-Y placering samt typisk hvilke beregningslag den er filtersat i. Denne information bruger koden til at identificere hvilke beregningsceller der bliver påvirket af boringen. Udover denne information vil man angive en tidlig afhængig eller stationær ydelse for boringen. Der er to metoder til at distribuere strømmingen mellem de beregningsceller, der er omfattet af boringens filtersætning.

Metode a) Flux ud af given beregningscelle beregnes ved at fordele mængden ligeligt mellem de involverede celler.

Metode b) Beregning af fordelingen af den samlede indvindingsmængde ud på de enkelte beregningsceller baseres på transmissivitet angivet for beregningscellerne samt den beregnede afsækning. Hvis afsækningen betinger at den øverste del af filtret ligger over vandspejlet vil ydelsen blive omfordelt således at der kun udtages vand fra de beregningsceller, der ligger under vandspejlet. Fra disse celler vil fordelingen af ydelsen yderligere blive bestemt udfra den hydrauliske ledningsevne af den enkelte beregningscelle.

Metode b) er mere elegant, idet der sikres en mere korrekt beskrivelse af den vertikale strømning nær boringen. Desuden kræves der ikke ekstra information for at vælge denne beskrivelse.

6.4 REFERENCER

- Anderson, M.P. and W.W. Woessner (1992): Applied Groundwater Modelling. Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.
- Hansen, S., H.E. Jensen, N.E. Nielsen and H. Svendsen (1991) Simulation of nitrogen dynamics and biomass production in winter wheat using the Danish simulation model Daisy, *Fertilizer Research*, 27, 245-259

Kapitel 7 DISKRETISERING AF MODELOMRÅDET I TID OG STED

Adam Brun

Afdeling for Grundvand, Affald og Mikrobiologi, DHI - Institut for Vand og Miljø

Nøglebegreber: Randbetingelser, stationær, ikke stationær, fastholdt tryk, flux, indvinding.

ABSTRACT: Diskretisering består hovedsagelig i at opdele den fysiske model rumligt i mange beregningsceller. Denne samling af beregningsceller kaldes her det numeriske net. Det numeriske net vil afhængigt af metodikken, finit differens eller finit element, kunne udformes forskelligt. Beregningsresultatet vil dog ikke variere væsentligt mellem de to metoder. Ved ikke-stationære simuleringer skal beregningsperioden opdeles i tidsskridt. Denne opdeling gøres primært ud fra brugerens ønske om at kunne anvende beregningsresultaterne efterfølgende og sekundært udfra ønsket om en passende beregningsnøjagtighed.

7.1 DISKRETISERINGSTYPER

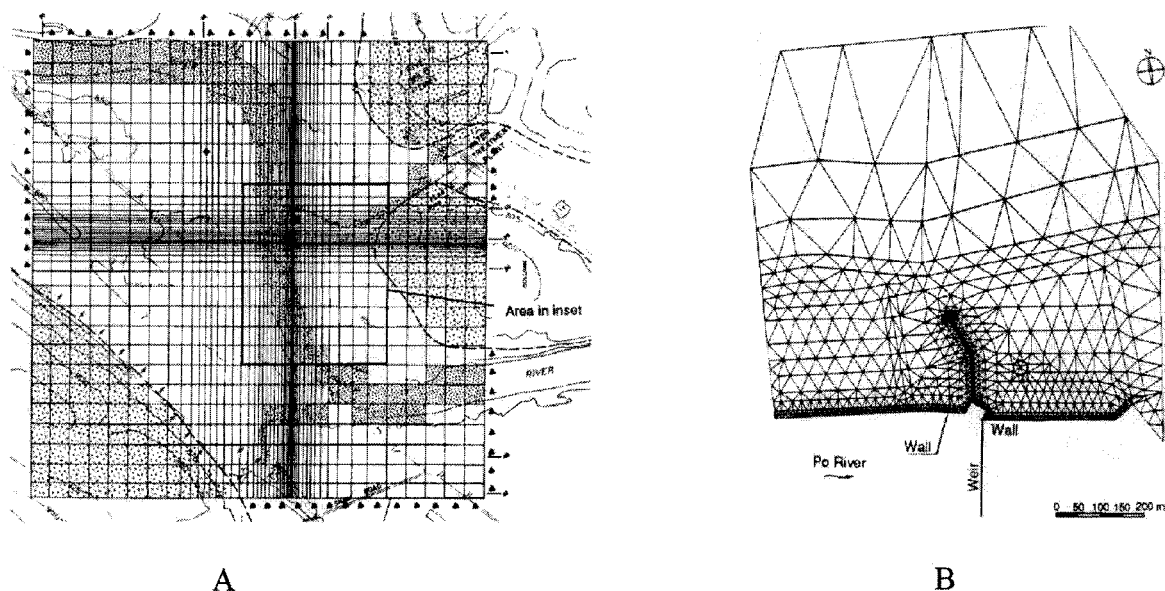
En numerisk løsning af strømningsligningen medfører, at modelområdet må opdeles i beregningsområder, såkaldte beregningsceller. Denne samling af beregningsceller kaldes her det numeriske net. Hver beregningscelle har individuelle parameterværdier. Generelt er der to forskellige metoder til at opdele den fysiske model i beregningsceller, finit differens (FD) og finit element (FE). De to metoder vil ved samme diskretiseringsgrad producere stort set det samme resultat for en given problemstilling, men adskiller sig væsentligst i, hvilken geometrisk form beregningscellerne kan have. Normalt arbejder FD-koder med rektangulære kasser mens FE-koder arbejder med trekanter eller polygoner (eksempler på undtagelser er dog Karup Å modellen, Suså model/INGA som begge er FD modeller der arbejder med polygoner). FE kan i det tilfælde at der anvendes trekantede elementer, men større nøjagtighed beskrive rundinger på randene. En tilsvarende præcision med FD vil kræve en finere diskretisering.

7.1.1 FD og FE

Finit differens bygger på, at beregningscellerne opbygges af retvinklede beregningsceller, hvor siderne afgrænser den geometriske udstrækning, typisk udformet som en slags "skoæsker". Andre former er mulige, eksempelvis polygoner men har ikke fundet anvendelse i de senere år. Typisk vil en beregningscelles top og bund have den samme størrelse og horisontale udstrækning. Siderne derimod kan have varierende højde. Dette giver mulighed for at følge den vertikale variation i geologiske lag med sit numeriske net. Siderne på to tilstødende beregningsceller har dog altid den samme størrelse. Antallet af beregningsceller er derfor altid konstant i dybden. Et FD-beregningsnet er eksemplificeret i Figur 7.1.

Finit element bygger på, at beregningsceller er afgrænset af hjørnepunkter, samt at den geometriske form ikke er begrænset til "skoæsker". FE beregner principielt trykniveauet stedsligt kontinuert i det metoden tager udgangspunkt i at trykniveauet et givent sted inden for et element kan beregnes ved interpolation mellem alle hjørnepunkterne, der afgrænser det individuelle element. Denne interpolation foretages ved at vægte bidraget fra hvert enkelt hjørnepunkt udfra afstanden. Vægtningfunktionen vil typisk være lineær men også andre former for vægtningfunktioner kan anvendes. I det tilfælde at man anvender sammen geometriske form som FD og man anvender lineære vægtningfunktioner vil det resultere i løsningen af akkurat det samme ligningssystem. FE metoden giver større frihed i valget af geometriske former som eksemplificeret i figur

1, hvor der er anvendt triangulære elementer. Typisk, men ikke nødvendigvis, vil man lade top og bund have samme størrelse og overlejre hinanden, hvilket giver beregningstekniske fordele. Ved meget komplekse geometriske former vil vægtningsfunktionerne være meget komplekse dette vil

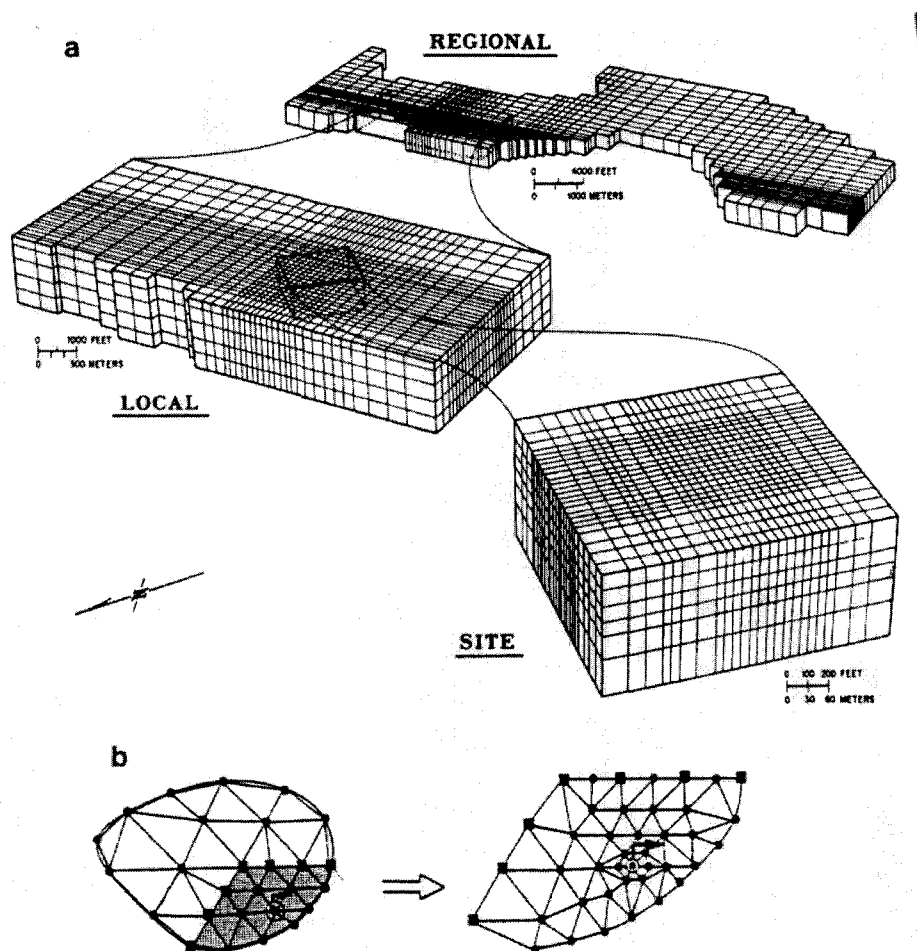


Figur 7.1 A: Eksempel på finit differens beregningsnet B: Eksempel på finit element beregningsnet.

igen resultere i løsningen af meget komplekse matrice systemer. Da dette medfører en forøget beregningstid vil man i mange tilfælde anvende simple FE beregningsnet samt simple geometriske former der generer en hurtigere løsning. Ved denne simplificasjon tilnærmes FE metoden meget til FD metoden. I de fleste tilfælde vil usikkerheder på parameter- og dataværdier fuldstændigt overskygge forskellen mellem beregninger foretaget med FD og FE. Ligeledes vil FD muligheder for forfining af beregningsnettet i delområder kunne matche FE metodens mulighed for varierende element størrelser og geometriske former, både i præcision og i beregningstid.

7.1.2 Ækvivalente eller varierende grid

Det er muligt for både FD og FE at forfine beregningsnettet i delområder. Dette er vist i figur 7.2. Denne finere diskretisering laves typisk i områder, hvor vandspejlsændringen er specielt stor, eksempelvis nær indvindingsboringer. FE kan lave en mere sofistikeret diskretisering i forhold til FD, hvor man er mere bundet af skoæskeformen på beregningscellerne. Et andet formål med at diskretisere finere kan være, at man i et delområde ønsker at regne mere detaljeret, eksempelvis på en punktfurening eller et specifikt opland til en enkelt boring.. Dette kan gøres direkte ved at diskretisere finere i delområdet. Et indirekte alternativ til dette er at operere med en "grov" model for vandløbsoplandet, her kaldet den regionale model, og en finere model for delområdet, her kaldet lokalmodellen. De fleste koder supporterer, at man kan udtrække randbetingelser fra den regionale model efter endt simulering og bruge disse som randbetingelser i den lokale model, se kapitel 6. Denne fremgangsmåde er ikke så præcis som den direkte, men er i mange situationer lettere og dermed hurtigere at arbejde med. Dette muliggør, med den samme indsats, at gennemregne flere scenarier.



Figur 7.2. Eksempel på anvendelse af delmodeller i finit differens (a) og finit element (b) beregningsnet.

7.2 TIDSSKRIDT

En numerisk model er inden start fodret med startbetingelser, også kaldet initialbetingelser, se kapitel 9. Disse startbetingelser beskriver, hvordan trykniveauet er i hver enkelt beregningscelle, se eventuelt kapitel 0. Under opsætningen af modellen har man beskrevet, hvorvidt man vil lave en stationær simulering, altså en beregning af trykniveaufordelingen, hvis alle randbetingelser er uforandrede i tiden, eller en ikke-stationær simulering, hvor man vil beregne trykniveaufordelingens variation med tiden. I det sidste tilfælde vil man fortælle modellen, hvilken periode modellen skal beregne, eksempelvis 1.1.1990 til 31.12.2010. Ud over perioden vil man typisk også angive, med hvilket interval (tidsskridt) man vil have udskrevet beregningsresultater, typisk trykniveauer, samt forskellige afledte værdier, strømningshastigheder, vandudveksling over rande med mere. Dette tidsinterval skal dels tilgodese behovet for præsentation af resultaterne, dels tilgodese behovet for at kende strømningshastighederne i en efterfølgende partikelbanesimulering. Koden vil som udgangspunkt opdele beregningen i tidsskridt svarende til brugerens ønsker. Dog kan det være nødvendigt at lave tidsskridtet kortere i perioder for at sikre nøjagtigheden, se afsnit 7.2.3.

7.2.1 Valg af diskretisering

To modstridende faktorer bestemmer valget af diskretiseringen. Ønsket om præcision medfører et behov for mange beregningsceller og små tidsskridt, hvilket vil medføre øgede krav til den computer, der skal udføre beregningerne. Omvendt vil man jo gerne operere med små beregningstider. Beregningstidslængder for ikke stationære simuleringer på ½-1 dag for et stort opland er dog typisk meget kort i forhold til dels den tid, der forud er medgået til opsætning af modellen, og dels den tid, man efterfølgende skal bruge på at analysere resultaterne. Generelt er det muligt med almindelige kraftige computere at diskretisere så fint, at usikkerhederne på beregningsresultaterne må tilskrives mangler i procesbeskrivelsen samt præcision af parameter- og dataværdier. I det tilfælde at der ønskes gennemført et meget stort antal scenarier, eksempelvis i forbindelse med invers modellering, er beregningstiden dog afgørende for detaljeringsgraden i disse øvelser.

7.2.2 Diskretisering i sted

Diskretisering i stedet består i at opdele den fysiske model i mindre kasser, et såkaldt numerisk net, hvor hver beregningskasse tilskrives samme parameterverdier og beregningsmæssigt tildeles ét trykniveau. Følgende forhold bør inddrages ved valget af numerisk net og dermed den stedlige diskretisering:

- variationer i vandspejlet
- akviferegenskaber
- retning af strømning samt andre forhold, der spiller ind på valget af randbetingelser
- geologisk lagdeling
- stedslig variation i infiltration, oppumpning, udveksling med vandløb
- antal beregningsceller
- behov for finere diskretisering i delområder

I de områder, hvor der er en stor variation i grundvandsspejlet, vil der være et behov for en finere diskretisering. En beregningskasse har kun én grundvandsstand, altså skal der en del kasser til at beskrive eksempelvis den trompetform, en grundvandssænkning typisk har.

Beregningscellerne skal være så små, at de beskriver den geologiske model korrekt. Hvis der ønskes inddraget små inhomogeniteter i form af 5-10 cm horisontale lag, må den valgte beregningslagstykkelse for disse lag nødvendigvis ikke være større end dette.

Ved den senere indlæggelse af randbetingelser kan det være en fordel, hvis modelområdet var aksialt sammenfaldende med den overordnede strømningsretning. Dette gør det mere simpelt dels at fastsætte, hvilken type randbetingelse der er mest passende, og dels at tilskrive værdier til randbetingelserne.

Det er nødvendigt at inddele i det horisontale plan, således at man kan "opløse" området tilpas detaljeret. Eksempelvis vil en inddeling i 500x500 meter kasser ikke kunne anvendes til at udpege oplande for to individuelle borer, der er placeret med 1500 meters mellemrum. Der vil simpelthen ikke være den nødvendige opløsning (antal beregningsceller) mellem de to borer. Antallet af beregningsceller vil afgøre, hvor store krav der stilles til computerkraft. Ved en forøgelse af antallet vil beregningen kræve mere af computeren, samtidigt vil præ- og postprocessing alt andet lige tage længere tid. For at kunne begrænse antallet af beregningsceller er der udviklet metodikker til at regne med en finere diskretisering i delområder. Dette gøres principielt på to måder, enten arbejdes der i et numerisk net, hvor der er finere diskretiseret i delområder, eller også regnes der med en regional model, hvorfra der udtrækkes randbetingelser til en lokal model. Den første metode vil producere mere korrekte resultater, omvendt vil den anden metode være mindre computerkrævende. Der er ingen generelle retningslinier for, hvornår den ene eller den anden metode kan anvendes. Typisk vil man starte med en grov model, og når beregningstiderne synes for lange, vil man begynde at overveje at skifte til en opdelt model. Den vertikale diskretisering er der ikke tilsvarende belyst i litteraturen. Generelt vil man forsøge at holde antallet nede i det der er en lineær sammenhæng mellem antallet af beregningsceller og antallet af beregningslag. Hvis der ønskes gennemført en stoftransport simulering efterfølgende er det vigtigt at huske på at en beregningscelle er repræsenteret ved ét koncentrationsniveau. En eventuel kilde vil altså blive

fordelt (som minimum) i hele den øverste beregningskasses vertikale udstrækning momentant. På den møde vil stoffet, måske noget misvisende, blive transporteret vertikalt meget hurtigt.

7.2.3 Diskretisering i tid

For at sikre en passende beregningsnøjagtighed må tidsskridtet ikke være for stort. De fleste modeller har automatiseret denne proces og vælger selv tidsskridtlængde ud fra brugerens specifikation af, hvornår der ønskes resultater gemt, en maksimal tidsskridtlængde samt en ønsket præcision i beregningen. Modellen vil således løbende tilpasse tidsskridtet for at overholde disse ønsker. Samtidigt vil modellen, hvis der er et beregningsmæssigt behov, skrue endnu længere ned for tidsskridtlængden for at sikre præcisionen. Hvis man har tidsvarierende randbetingelser, er det også en god idé at skele til, hvordan disse er indbygget i forhold til tidsskridtet. Dette er specielt vigtigt for strømningsbaserede randbetingelser. I de fleste tilfælde vil kravet til beregningsnøjagtigheden være bestemmende for længden af tidsskridtet. Ved koder, der kobler grundvandsstrømning med vandløb eller umættet zone, er fastsættelse af tidsskridtlængden noget mere kompliceret. De forskellige koder har således individuelle måder at håndtere denne problemstilling på. Der henvises til dokumentationen af disse for yderligere information.

7.3 DISKRETISERINGSFEJL

Der opstår altid fejl ved en numerisk løsning, dels numeriske fejl fra selve løsningsalgoritmen og dels fejl grundet den skala, de forskellige processer foregår i.

7.3.1 Numeriske fejl

Ved en numerisk løsning vil der altid opstå beregningsfejl, eller såkaldte numeriske fejl. Denne fejl stammer altså ene og alene fra den metode man har valgt til at løse de matematiske ligninger med. Disse fejl opstår ved løsning af de meget store matricesystemer, der indgår som en del af den numeriske løsning. Typisk løses disse ikke direkte, men ved gentagne iterationer, som afslutter, når man har nået et ønsket kriterium, et såkaldt konvergenskriterium. Konvergenskriteriet udtrykker altså den "fejl", der maksimalt må være ved løsningen af matricesystemet for ét tidsskridt. Konvergenskriteriet udtrykkes typisk ved, at der ikke i nogen beregningscelle må overskrides en maksimal variation i trykniveauet mellem iterationer. Konvergenskriteriet angives typisk af brugeren. Hvor stor indflydelse det har på beregningerne, er meget afhængigt af den specifikke modelopsætning. Hvis konvergenskriteriet er specificeret som en absolut størrelse, eksempelvis 1 cm, er det ensbetydende med, at iterationerne afsluttes med en fejl i denne størrelsesorden. 1 cm synes rimeligt ud fra den præcision, som man kan måle trykniveauer i felten med, samt den usikkerhed, der er generelt. Betydningen af dette konvergenskriterium vil således ikke kunne observeres tydeligt i trykniveauberegningen. Problemet opstår, når man kigger på vandstrømningen. Typisk er vandspejlsvariationer i horisontalen i størrelsesordenen få promille, tilsvarende i vertikalen. Her vil en fejl på 1 cm være ensbetydende med en meget stor fejl i beregningen af den vertikale strømning. Denne fejl kan give sig udtryk i en såkaldt vandbalancefejl, altså at der ikke er balance, modellen generer eller fjerner vand. En sådan vandbalancefejl vil blive rapporteret af de fleste koder, enkelte kan indbygge det som et ekstra konvergenskriterium, og man ville blive gjort opmærksom på, at der er noget galt. Denne fejl risikerer man at overføre til den efterfølgende beregning af partikeltransport eller stoftransport, hvor fejlen kan medføre, at stof dannes eller fjernes i enkelte beregningsceller. For at undgå denne fejl er det derfor nødvendigt at sætte konvergenskriteriet så lavt, at det både tilgodeser vertikale og horisontale gradienter, i mange tilfælde ned til 1 mm eller under. Typisk vil man sætte konvergenskriteriet lidt højere i de indledende simuleringer for at få beregningerne til at køre hurtigere. Ved de endelige produktionskørsler vil man så reducere konvergenskriteriet til, hvad der af beregningstidsmæssige årsager er muligt. Et for lavt konvergenskriterium kan medføre, at løsningsalgoritmen aldrig vil opnå det ønskede konvergenskriterium. Typisk har koder mulighed for, at man kan lægge loft på antallet af iterationer. Når dette loft nås,

vil koden enten vælge at fortsætte beregningen med den opnåede præcision eller alternativt afslutte simuleringen med en fejlmeddelelse.

7.3.2 Skalaeffekter

Skalaeffekter beskriver det fænomen, at beregningsresultaterne påvirkes af den skala, hvormed processen beskrives. Dette skyldes, at man opdeler sit distribuerede fysiske system, der består af kontinuerte processer samt en kontinuert geologisk model, i "diskrete" kasser. Et eksempel kunne være beskrivelsen af den hydrauliske ledningsevne. Hvis det numeriske net ikke er fint nok til at opløse detaljer i geologien, er det nødvendigt at tage højde for dette ved indlæggelse af "effektive" parameterværdier. Et geologisk lag, der består af vekslende sand og lerlag, skal, hvis man ønsker, at dette skal repræsenteres af ét beregningslag, tillægges parameterværdier svarende til en seriel henholdsvis parallel midling for den horisontale og vertikale ledningsevne. Alternativt skal de opløses i individuelle beregningslag. En andet eksempel kunne være, at man ønsker at styre indsvivningen til en vandløbsstrækning ved at indlægge en vis permeabilitet i de tilstødende beregningsceller. Denne permeabilitetsjustering vil være afhængig af, hvorvidt beregningscellen er 100 m eller 500 meter. Et tredje eksempel kunne være indsvivning til en boring. Hvis der ønskes en meget detaljeret beskrivelse af sænkningstragten, er det nødvendigt at indlægge en meget fin diskretisering rundt om boringen.

Ved en automatiseret indlægning af parameterværdier fra en geologisk model vil beregningsresultatet være afhængigt af diskretiseringsgraden. Jo flere celler, jo bedre opløsning af inhomogeniteter, lagenes højdevariation osv.

Ud over de ovenstående skalaeffekter, der kommer fra det at lægge sit kontinuerte fysiske system ind i diskrete delområder, beregningsceller, er der også skalaeffekter i den numeriske løsning. Skalaeffekter vil influere på resultaterne, når der er for stor kontrast mellem, hvorledes tilstødende beregningsceller reagerer på forandringer. Hvis der opereres med eksempelvis to beregningsceller, hvor den øverste har en tykkelse på 5 meter, og den nederste har en tykkelse på 5 cm, vil dette beregningsteknisk resultere i stor forskel i matriceværdierne med tilhørende større sandsynlighed for fejl i beregningsresultaterne. Det er altså ikke en god ide at diskretisere, således at to celler reagerer meget forskelligt på forandringer. I ovenstående tilfælde vil den nederste celle have et meget lille volumen og derfor være mere "stiv" end den ovenstående celle, der er mere "elastisk". Tilsvarende kan der være problemer, hvis en beregningscelles vandrette komponent vandudveksler meget forskelligt fra den horisontale komponent. Dette vil tilsvarende resultere i store variationer i matriceværdierne med mulighed for forøgelse af fejl. En generel konklusion må være, at man skal passe på med via diskretiseringen at inkludere for store forskelle mellem beregningscellerne. En tommelfinger regel, når man forfiner et finit differensnet, er, at forskellen i størrelsen mellem to celler ikke må være større end en faktor 1,5 (Anderson and Woessner 1992).

Der kan også optræde skalaeffekter i de koblede modeller. Hvis man kobler en vandløbsmodel med en grundvandsmodel, vil de to systemer have meget forskellig responstid. Vandløbsmodellen vil reagere i størrelsesorden minutter og timer. Grundvandsmodellen for det regionale opland har måske en tidshorison på typisk dage.

7.4 HVORDAN TESTER MAN SIN DISKRETISERING

En simpel undersøgelse af diskretiseringsgraden, er at sammenligne resultaterne fra to simuleringer udført med forskellig diskretisering. Simuleringerne sammenlignes dernæst ud fra beregningsresultaterne, det være sig beregnede trykniveauer, vandbalance og/eller andet. Resultatet vil adskille sig mest for oplande med en varieret geologi. For disse oplande vil en finere diskretisering medføre, at lag og linser kan repræsenteres bedre. Dermed ændres der på den hydrauliske ledningsevne i nogle beregningsceller. Dette medfører, at beregningerne tilsvarende afviger. En afvigelse, der opstår som resultat af dette, er altså ikke en beregningsfejl, men snarere en fejl i overgangen fra den fysiske model til den numeriske model. En anden metode er at først afprøve om

der kan beregnes stationært på modelopsætningen. Hvis der opsår konvergensproblemer ved løsningen af denne, kan det antyde at der er diskretiseret for groft.

7.5 REFERENCER

Anderson, M.P. and W.W. Woessner (1992): Applied Groundwater Modelling. Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.

Kapitel 8 PROCESSERING AF TIDSSERIEDATA

Anders Refsgaard
DHI – Institut for Vand & Miljø

Nøglebegreber: Tidsseriedata, klimadata, vandindvinding, trykniveau og vandføringer

ABSTRACT: I forbindelse med etableringen af en grundvandsmodel er der ofte behov for anvendelse af tidsseriedata og processeringen af disse er en vigtig del af et modelprojekt. Specielt i forbindelse med ikke-stationære modeller vil tidsseriedata udgøre et væsentlig grundlag for modelopstillingen og –kalibreringen. Tidsseriedata leveres af mange forskellige dataleverandører, og i enkelte tilfælde kan man finde de samme oplysninger fra forskellige kilder. DMI er hovedleverandør af meteorologiske informationer, mens amterne selv ligger inde med informationer om vandindvinding, trykniveauer og i mange tilfælde vandføringer. Vandforsyningerne, GEUS, DMU, Dansk Jordbrugsforskning (DJF) og kommuner er andre dataleverandører, som kan bidrage med værdifuld information.

8.1 NEDBØR, POTENTIEL FORDAMPNING OG TEMPERATUR

Den drivende faktor i alle grundvandsmodeller er grundvandsdannelsen. Denne kan estimeres på forskellig vis, men nedbørsmålinger vil under alle omstændigheder indgå i beregningerne. I ikke-stationære, integrerede grundvandsmodeller er det daglig nedbør fordelt over modelområdet – i det følgende kaldet arealnedbøren, der bør indgå.

Arealnedbøren bestemmes som regel ud fra et antal nedbørsmålere i området. Der findes flere end 500 klimastationer i Danmark og placeringen af disse, deres læforhold og forskellige andre informationer kan findes på <http://www.dmi.dk/vejr/index.html> under vejrobservationer og stationsoversigt. Her findes både kort med placeringen af og lister med information om stationerne, men data kan kun downloades, hvis man har en aftale.

Registreringerne af daglig nedbør skal justeres for forskellige effekter, som bevirker, at den registrerede nedbør er mindre end den faktiske. Vindeffekter (en del af nedbøren blæser hen over nedbørsmåleren uden at registreres) udgør langt den største fejlkilde, mens wettingtab (der bruges initielt lidt nedbør til at gøre regnmåleren våd, inden der registreres noget i måleren) er af mindre men dog målelig betydning. For at få den reelle nedbør anvendes normalt nogle generelle korrektionsfaktorer, som er bestemt månedsvis for forskellige læforhold af målestationen, Allerup et al. (1998). Nedenstående tabel viser korrektionerne for forskellige læforhold, og som det fremgår af tabellen, er korrektionen i januar måned mere end 50% for friteksponerede stationer, mens den er mindre end 10% for nedbørsstationer under optimale læforhold om sommeren. Udover de generelle korrektionsfaktorer er der for udvalgte vejrstationer bestemt korrektionsfaktoren for perioden 1989 til 1999, Vejen et al. (2000). Der kan således forekomme betydelige fejl på den enkelte nedbørsmåling ved ikke at korrigere for disse effekter.

Tabel 8.1 Standardværdier for nedbørskorrektioner (%), Allerup et al., 1998.

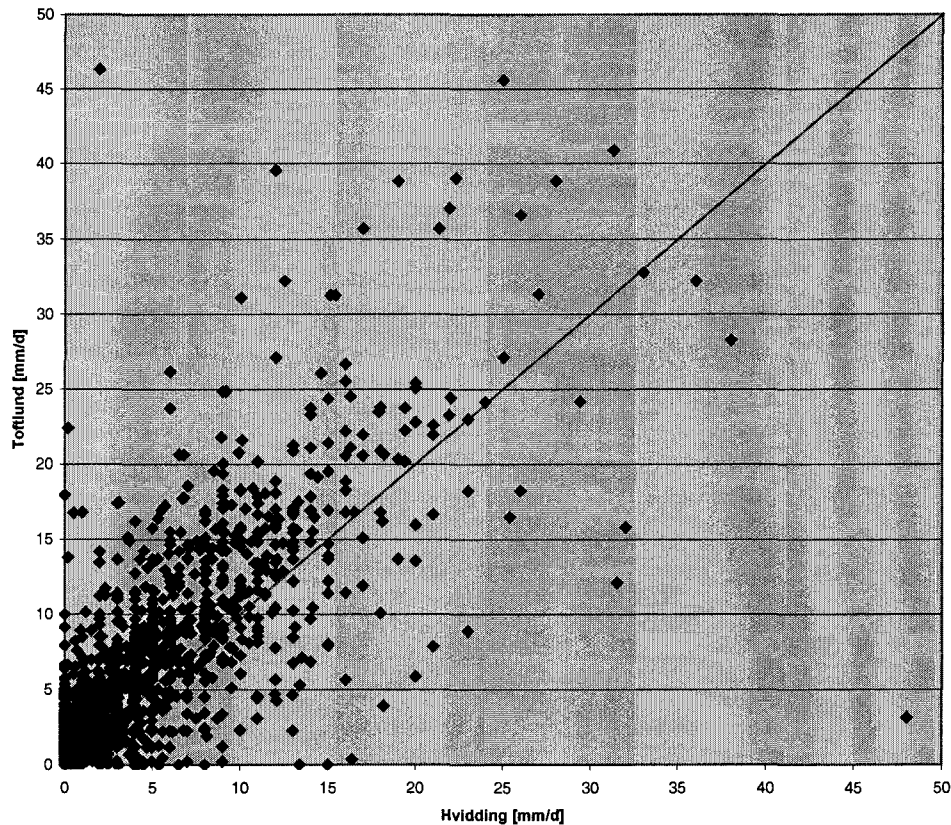
Læforhold	J	F	M	A	M	J	J	A	S	O	N	D	År
frit eksponeret	53	53	45	29	16	13	12	12	13	17	29	48	27
moderat læ	41	42	35	24	13	11	10	10	11	14	23	37	21
ideelt læ	29	30	26	19	11	9	8	8	9	10	17	26	16

De fleste nedbørsmålere er til tider udsat for nedbrud og "huller" i tidsserier er ofte forekommende. Udfyldning af disse er nødvendigt for at beregne sammenhængende tidsserier til bestemmelse af arealnedbøren. Dette kan ske på mange forskellige måder, men den mest anvendte er at udnytte vægtede data fra en eller flere nærliggende stationer. Først undersøges korrelationen mellem stationerne ved at tegne dobbeltmasseplot af månedsværdier. Det vil sige, at den korrigerede nedbør for de to stationer plottes mod hinanden i et sædvanligt x-y-koordinatsystem. Hvis værdierne ligger på en ret linje, er der god korrelation, og forholdet mellem årsmidlerne kan anvendes direkte til at korrigere nedbørsdata og efterfølgende fylde hullerne ud. Man kan gå også supplere med flere stationer, hvis der er overlappende perioder med "huller" i registreringerne. Det er under alle omstændigheder fornuftigt at undersøge korrelationen mellem stationerne, da dette kan afsløre skift i læforhold eller direkte flytning af stationen, hvis der observeres skift i korrelation.

Bestemmelsen af arealfordelingen af nedbøren er ligeledes en vigtig del af en modelopgave. Nedbørsfordelingen afhænger af topografiske forhold, afstand til kysten, fremherskende vindretning og andre geografiske karakteristika. Som grundlag for udarbejdelse af arealnedbøren bør man som udgangspunkt udarbejde et såkaldt isohyetkort – et konturkort over middelnedbøren baseret på de tilgængelige målestationers årsmiddelnedbør. Derefter bør der foretages en manuel justering, hvor der tages højde for topografiske forhold og afstand til kyster. Under danske forhold regner det væsentligt mere i højereliggende områder end i dalene og nedbøren stiger med afstanden til kysten. Herefter inddeles arealet i et antal områder med samme nedbør, og den endelige arealnedbør beregnes ved at vægte en eller flere stationer til beregning af nedbøren i hvert område. Vægtene bestemmes som forholdet mellem den "teoretiske" middelnedbør og den målte for de involverede stationer. Det kan være nødvendigt med optegnelse af Thiessen polygoner (optegnes som midtnormalerne mellem stationernes forbindelseslinjer) som supplement for at kunne bestemme de endelige nedbørsområder.

I eksemplet Brøns Å, Appendiks 2, er modelområdet begrænset til ca. 100 km², og der er kun fundet 2 nedbørsstationer inden for eller tæt på området. Stationerne betegnes af DMI 26190 Toftlund og 25350 Hviding. Der temmelig stor forskel i nedbøren fra de to stationer, hvilket skyldes beliggenheden dels i form af afstanden til Vesterhavet dels den topografiske beliggenhed af stationerne. Stationen i Hviding ligger ca. 10 km nord for udløbet af Brøns Å i kote 8, blot et par km fra kysten, mens station Toftlund ligger ca. 6 km øst for modelområdet i kote 52. Nedbøren stiger kraftig inde i landet og koteforskellen bidrager til at øge forskellen mellem de to stationer. Toftlund har betegnelsen lækategori A, mens Hviding har lækategori B, men data til modellen er korrigeret af Sønderjyllands amt, så opgaven har blot indeholdt en fordeling over området.

I et dobbeltmasseplot, hvor nedbøren fra de to stationer plottes mod hinanden, Figur 8.1, er det tydeligt, at der er relativ god korrelation mellem de to stationer, men forholdet mellem dem er forskellig fra 1. Nedbøren over modelområdet er fordelt efter en topografisk nøgle, hvor data for Toftlund repræsenterer den østligste halvdel af området, mens data fra Hviding repræsenterer den vestligste (det skal bemærkes, at projektet er et demonstrationsprojekt, med fokus på at demonstrere nitratudvaskningen fra landbrugsområder, hvorfor de meteorologiske forhold ikke er undersøgt specielt nøje).



Figur 8.1 Dobbeltmasseplot af nedbøren fra station Hviding og Toftlund

Ved overførsel af modeller fra rådgivere til amtet er det vigtigt dels at kunne gennemskue beregningen af arealnedbøren dels at være i stand til at opdatere med nye målinger af nedbøren eller ændringer i antallet eller placeringen af stationerne.

DMI foretager beregninger af arealnedbør og andre meteorologiske parametre i et af deres såkaldte klimagrid, Scharling (1999a), med opløsninger på 10x10, 20x20 og 40x40 km². Dette kan i visse tilfælde være en anvendelig nedbør, men der vil så være store forskelle i nedbøren fra klimagrid til klimagrid. I konkrete modelopstillinger er det konstateret, at arealnedbøren bestemt ved anvendelse af den ovenfor beskrevne metode afviger ca. 10% fra den i klimagrid 10x10 km² beregnede nedbør, Århus Amt (2000).

En del af nedbøren fordamper til atmosfæren igen, og er derfor ikke til rådighed til grundvandsdannelse eller vandløbsafstrømning. I beregningen af fordampningen indgår den potentielle fordampning, som er betegnelsen for den maksimale fordampning, som kun forekommer, når der er kraftig plantedække og vandindholdet i rodzonen er over en vis grænse. I princippet er den potentielle fordampning vegetationsafhængig, idet den potentielle fordampning fra et skovdækket areal kan være noget større end den potentielle fordampning efter den ovenfor beskrevne definition. Dette kan ses der dog ofte bort fra.

Den potentielle fordampning kan måles ved hjælp af den såkaldte pandemetode (i Danmark hedder fordampningsmåleren HL315), hvor fordampningen fra en fri vandoverflade bestemmes. Denne bestemmelse er dog vanskelig, og der skal korrigeres med månedsafhængige faktorer for at få den potentielle fordampning for en overflade af kortklippet græs. Fordampningen bestemmes

derfor ofte indirekte ved anvendelse af formler, hvori indgår forskellige målelige klimatiske variable foreksempel indstråling, temperatur, fugtighed og vindhastighed. Den mest kendte formel er formentlig Penman's fordamningsformel, men i Danmark anvendes en modificeret udgave af denne beskrevet i Mikkelsen og Olesen (1991). Denne formel danner ligeledes grundlag for DMI's beregninger af den potentielle fordamning i det såkaldte klimagrid i opløsningerne 20x20 km² og 40x40 km², Scharling (1999b). Dansk Jordbrugsforskning (DJF) er den normale leverandør af data vedrørende potentiel fordamning. Herfra kan data rekvireres på forskellig tids- og rumlig skala; dagsværdier på forskellige regioner i Danmark er den bedste opløsning, der kan fås. Beregningerne er baseret på Makkink-ligningen, som kan findes i Makkink (1957), men som også er beskrevet i Mikkelsen og Olesen (1991).

Temperaturen indgår ligeledes i integrerede, dynamiske modeller med overfladeafstrømning til bestemmelse af sneakkumulationen og -smeltning. Typisk er døgnmiddeltemperaturen ikke tilgængelig, men blot maksimum- og minimumtemperaturen. Der vil ofte ikke være grundlag for at arbejde med en finere tidsopløsning end døgnbasis, og en god tilnærmelse til bestemmelse af døgnmiddeltemperaturen er en midling af maksimum og minimum.

Potentiel fordamning og temperatur, som også indgår i modelberegningerne er i eksemplet Brøns Å, er ligeledes modtaget direkte fra Sønderjyllands Amt. Fordampningsdata er oplyst at stamme fra Statens Planteavlsvforsøg beregnet ved ovennævnte metode, mens temperaturdata stammer fra Meteorologisk Institut – begge datatyper baseret på målinger fra en DMI klimastation.

8.2 AREALANVENDELSE, JORDTYPER, JORDFUGTIGHED OG AKTUEL FORDAMPNING

Den aktuelle fordamning er om muligt endnu sværere at måle end den potentielle, da den afhænger af den potentielle fordamning, arealanvendelse samt jordfugtigheden og den såkaldte rodzonekapacitet i de pågældende jordtyper i det konkrete område. Hvis man vil beregne den aktuelle fordamning, skal man derfor nødvendigvis indarbejde disse informationer i sine formler. Dette kan gøres på forskellig detaljeringsgrad af hvilke, der blot skal nævnes nogle få.

Forskellige begreber indgår i empiriske formler til beregning af den aktuelle fordamning. Rodzonekapaciteten er defineret som den del af jordens vandindhold, der er tilgængelig for planterne. Den udgør forskellen mellem markkapacitet, som er den maksimale vandmængde jorden kan tilbageholde, uden der sker nedsivning, og visnegrænsen, som er den nedre grænse for vandindholdet, hvortil planterne kan trække vand ud af jorden. Rodzonekapaciteten kan beregnes ud fra information om jordtype og roddybde for planterne. Andre begreber, som kan indgå i beregningen, er bladdækket eller bladarealindeks og rodfordeling over dybden.

Beregningen af den aktuelle fordamning er ofte baseret på at bestemme reduktionen af den potentielle fordamning. I Suså-modellen, Refsgaard (1981), er der beskrevet en metode, hvor reduktionsfaktoren beregnes som produktet af reduktion grundet ikke-optimal bladdække og reduktioner grundet jordfugtighedsbegrænsninger i flere øvre jordlag. Reduktionen grundet bladdække er antaget lineær i forhold til bladarealindeks, mens reduktionen i forhold til jordfugtighed er antaget ikke-lineær med forskellige sammenhænge afhængig af jordtypen.

Andre sammenhænge anvendt under danske forhold tager direkte udgangspunkt i markkapaciteten bl.a. den Nationale vandressource model, GEUS (1997) og Als-undersøgelsen, Sønderjyllands Amtskommune (1986). I begge tilfælde antages det, at der er potentiel fordamning, hvis vandindholdet i rodzonen er større end en vis værdi, henholdsvis 70% og 50% af markkapaciteten. Hvis vandindholdet er mindre end dette beregnes reduktionsfaktoren efter forskellige empiriske formler, henholdsvis en ikke-lineær og lineær sammenhæng. I begge tilfælde behandles vandindholdet i jorden som et magasin med maksimal fyldning svarende til markkapacitet og der holdes et vandbalanceregnskab for dette magasin; hvis nedbøren minus den aktuelle fordamning er større end markkapaciteten infiltrerer det overskydende vand ud af rodzonen. Den Nationale vandressource model arbejder med døgn-tidsskridt, mens Als-modellen arbejder i uge-tidsskridt.

MIKE SHE modellen anvender en lidt mere kompliceret metode, idet vandindholdet i jorden beregnes ved løsning af de fulde ligninger for strømning under umættede forhold, og anvender det beregnede vandindhold direkte i beregningen af den aktuelle fordampning. Ellers ligner MIKE SHE modellens metode andre metoder, idet der beregnes en reduktion af den potentielle fordampning ud fra forskellige empiriske sammenhænge mellem roddybde, roddensitet og bladarealindeks.

I alle metoder er der en arealmæssige fordeling af den aktuelle fordampning, da alle størrelser i de anvendte formler varierer over arealet. I konkrete modelopgaver opdeles området ofte i et antal type-områder, hvor jordtype, arealanvendelse, nedbør og potentiel fordampning er tilnærmelsesvis identiske. Dette begrænser antallet af beregningslementer, hvor beregningerne skal foretages og der sker en overførsel af resultaterne fra ét område til andre områder med identiske forhold.

Som det fremgår af ovenstående er de fleste variable til beregning af den aktuelle fordampning også tidsvarierende – roddybde, potentiel fordampning, bladarealindeks. Det er dog vanskeligt at opnå en bedre information end uge eller månedsbasis på flere af disse størrelser, men det er alligevel vigtigt at beregne den aktuelle fordampning på en mindre tidsskala, da den aktuelle fordampning ellers vil blive overvurderet.

I eksemplet Brøns Å er fordelingen af arealanvendelsen sket dels via en deterministisk/statistisk i det regionale modelområde, dels via en deterministisk fordeling i det lokale område. Arealanvendelsen kan inddeles i hovedgrupperne skov, vådområder, by, vådområder og landbrugsområder er identificeret ud fra tematisk kortgrundlag 1:50.000 og vist i Figur 8.2. Yderligere inddeling af landbrugsarealet er foretaget ud fra Danmarks Statistik, Landbrugsstatistik 1995, som beskriver, at landbrugsområder i Sønderjyllands amt kan opdeles i grupperne græs i omdrift (29%), vinterhvede (23%), vinterbyg (14%), vårbyg (20%), vinterraps (6%), ærter (2,5%) og roer (6%). Disse områder er fordelt over oplandet efter forskellige gødningspraksis og med forskellige sædskifter, hvilket resulterer i flere end 20 forskellige "afgrødetyper". Figur 8.3 viser, hvorledes landbrugsområdet ved en tilfældighedsfordeling er delt op i de enkelte afgrødetyper.

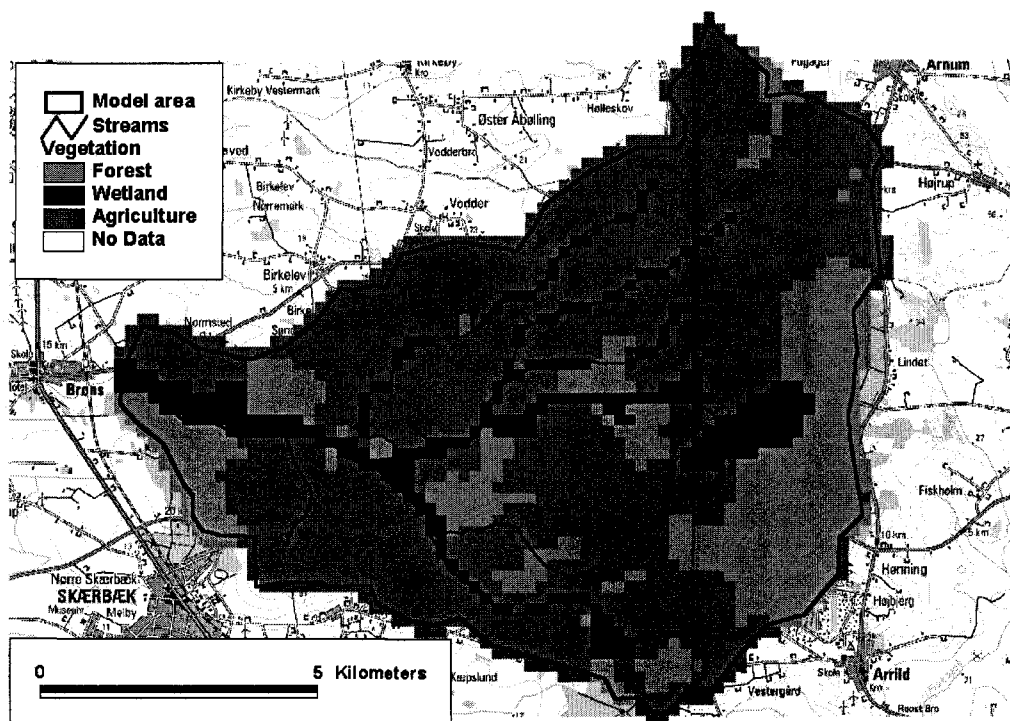
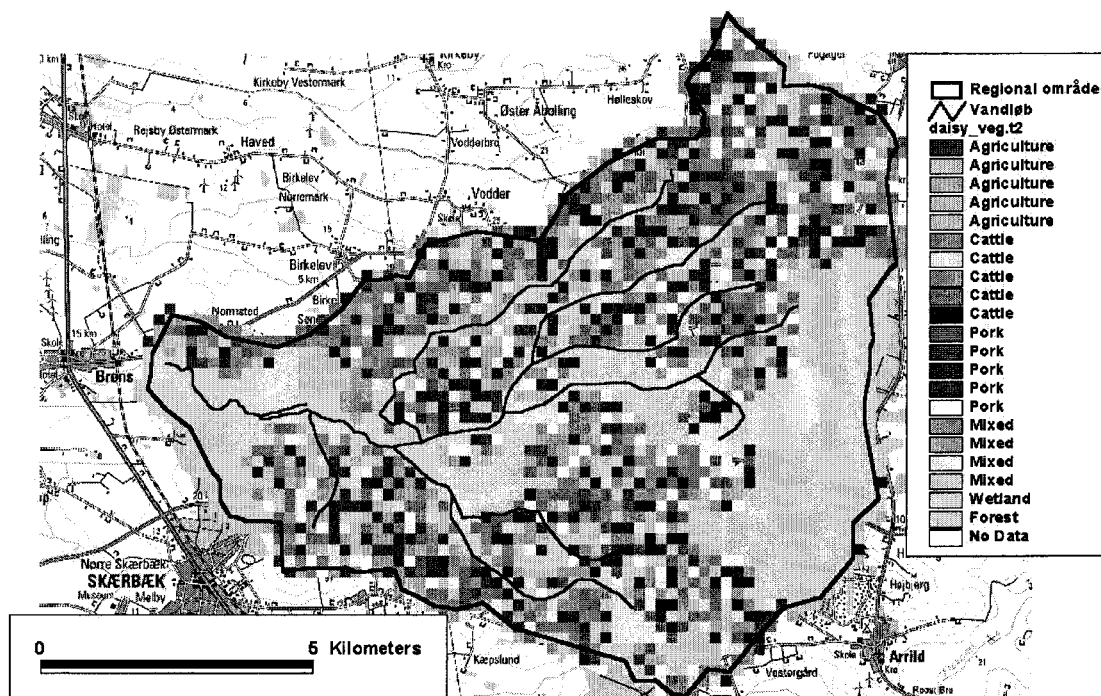


Figure 8.2 Opdeling af modelområdet Brøns Å i hovedgrupper for arealanvendelse



Figur 8.3 Fordeling af sædskifter i det regionale modelområde, Brønshøj Å

I det lokale modelområde, som dækker ca. 10 km², er der af en lokal landmand foretaget en undersøgelse af sædskifter og gødningsanvendelser på markniveau. Dette giver mulighed for at fordele disse deterministisk i de enkelte beregningspunkter svarende til de enkelte marker (det skal dog nævnes, at dette kun er relevant på helt lokal skala, hvor udvaskningen af nitrat fra gødningsanvendelse skal undersøges).

De forskellige parametre til beregning af den aktuelle fordampning skal findes i forskellige databaser og andre kilder. Information om jordtyper kan findes i GEUS kortarkiv 1:100.000 over jordartsfordeling i Danmark. DMU har for nyligt afsluttet et stort projekt vedrørende sammenstilling af forskellige data kaldet arealinformationssystemet (AIS), se ais.dmu.dk for yderligere information. Systemet er færdigudviklet i 2000 og antallet af praktiske anvendelser af systemet i forbindelse med grundvandsmodellering er begrænset, men må potentielt betegnes som værende stort. Arealanvendelsen er traditionelt blevet bestemt ud fra topografiske temakort, som identificerer hovedgrupperne by, skov, vådområder og landbrugsarealer. Landbrugsarealet opdeles efterfølgende efter forskellige afgrøder enten ud fra statiske angivelser, som publiceres i Danmarks Statistik (Landbrugsstatistik 19xx) på amtsplan, eller efter aktuelle afgrøder i forbindelse med detailstudier. Planternes roddybde, bladarealindeks og roddensitet kan findes i publikationer fra Statens Planteavlsvforsøg foreksempel Plauborg og Olesen (1991), mens den potentielle fordampning kan rekvireres som omtalt ovenfor.

8.3 VANDINDVINDING

Realistiske vandindvindingsdata er normalt de data, der er størst problemer med at fremskaffe specielt hvis det er detailmodeller, hvor det er ønskeligt at have informationen på enkeltboringer og med en god tidslig opløsning. Der er pligt til årligt at indberette den forbrugte/oppumpede vandmængde på kildepladsniveau, men specielt mange enkeltindvindere indberetter ikke eller indberetter den givne tilladelse.

Data er i langt de fleste tilfælde tilgængelige i en database i amtet – registreret under vandværksnummer eller anden form for identifikation, som relateres til vandforsyningen. Alternativt vedligeholder GEUS en database med alle indvindingstilladelser og årlige udpumpninger. Det er under processeringen nødvendigt at sammenholde identifikationsnumre og DGU-numre for boringerne på de enkelte kildepladser. I forbindelse med detailmodellering på kildepladser med flere boringer kan det være nødvendigt at fordele indvindingen på de enkelte boringer. Dette kan ske efter strømforbrug, som ofte er tilgængelig på boringsniveau, kombineret med pumpekaraktistik. På denne måde kan den tidlige variation ligeledes bestemmes, hvis det er nødvendigt for modelleringen, og den ikke er tilgængelig på anden vis. Visse kildepladser anvendes stadig hævertprincip, og her er det endnu sværere at bestemme den aktuelt oppumpede mængde. I mange tilfælde har vandværkerne mere detaljeret information til rådighed, f.eks. oppumpningen på ugebasis og på boringsniveau.

En del afværgeboringer medtages ikke i databaser over oppumpning til vandforsyning. I disse tilfælde skal der indhentes lokal information om sådanne foranstaltninger, som ofte skal findes hos sagsmedarbejdere i amtet.

Når alle indvindingsdata er indsamlet skal de – ligesom andre tidsseriedata – samles i et forståeligt format med tydelig reference til koordinater i området, hvor indvindingen foregår. Ligeledes her gælder det, at proceduren for etableringen skal være gennemskuelig for senere opdatering.

8.4 TRYKNIVEAU I FORM AF TIDSSERIER OG POTENTIALEBILLEDER

Kalibreringen og pålideligheden af grundvandsmodeller afhænger meget af tilgængeligheden af gode data. Ofte vil en grundvandsmodel kunne kalibreres stationært mod et øjebliksbillede af potentialet samt medianminimumsvandføringer, hvilket er et godt grundlag for videre kalibrering for transiente forhold.

Potentialebilleder er dannet ud fra konturering af pejlinger fra boringer i området. Billedet kan være godt nok til at danne sig et overblik over potentialeforhold og strømningsretninger, men som kalibreringsgrundlag skal man være opmærksom på en række fejkilder. De tilgrundliggende pejlinger er til tider udført over en længere periode, nivellement er ikke udført, men koten til boringen er aflæst på et kort, og i visse tilfælde optræder der pejlinger fra forskellige magasiner. Desuden ligger der en fortolkning i kontureringen, som i visse tilfælde ikke kan genspejles i modellen, fordi den geologiske/hydrogeologiske opfattelse af området ikke er sammenfaldende. Under alle omstændigheder skal de tilgrundliggende data kvalitetssikres, og værdierne i de enkelte pejlepunkter bør gives meget vægt i forhold til kontureringen. Potentialebilleder findes som regel hos amtet for forskellige perioder. Det er dog ofte bedre at anvende de enkelte pejleinformationer og vægte disse sammen med andre informationer til foreksempel invers modellering.

Under transiente forhold – selv et ”stationært” potentialebillede er i virkeligheden et transient billede, idet det er produktet af de påvirkninger systemet har været udsat for de seneste mange år – er tidsserier af grundvandspejlinger en vigtig information i forbindelse med kalibreringen. Variationen i potentialet er et produkt af mange påvirkninger, idet årstidsfluktuationer i grundvandsdannelsen, variationer i grundvandsoppumpning, ydre påvirkning fra nærtliggende områder, og interaktionen med varierende overfladevand giver anledning til variationer i grundvandspotentialet. Tidsserier af grundvandstryk er som regel tilgængelige hos amtet alternativt GEUS, men de større vandforsyninger ligger også inde med detaljeret information. En typisk pejlefrekvens er 4 til 6 gan-

ge om året. I de seneste år er der etableret en række kontinuerte pejlestationer, som ligeledes opereres dels af GEUS dels af amterne.

Fejlkilderne i tidsserier af pejladata ligger primært i at pejlingen kan være foretaget for tæt på kildepladser med skiftende oppumpning fra borerne. Dette kan influere direkte på pejlingen og kan give anledning til misfortolkning af variationer i potentialet.

8.5 AFSTRØMNINGSDATA VED MÅLESTATIONER OG SYNKRONMÅLINGER

Målinger af vandføringer i vandløb er traditionelt blevet foretaget og indsamlet af Hedeselskabets Hydrometriske afdeling. I dag findes disse data i stor udstrækning hos amterne, da de indgår i en række afrapporteringer omkring vandressourcer og i det hele taget anvendes aktivt i forvaltningen. Desuden har DMU en komplet database med kontinuerte vandstands- og afstrømningsmålinger.

De fleste vandføringsstationer er automatisk registrerende med daglige værdier, og en del kan fjernaflæses. Der udføres typisk måling af vandstanden i vandløbet, og via relationen mellem vandstand og vandføring (QH-relationen) bliver det omregnet til foreksempel daglig vandføring. Der er en del fejlkilder forbundet med bestemmelse af vandføringen bl.a. QH-relationen og interpolationen af denne mellem de direkte vandføringsmålinger. Usikkerheden på den enkelte vandføringsmåling er således ca. 5%, men der kan være større usikkerheder på beregnede vandføringer ud fra vandstand via QH-relationen.

Fra de målte hydrografer kan median-minimumsvandføringen bestemmes ved optegning af de årlige minimumsvandføringer i et sandsynlighedsdiagram og efterfølgende aflæsning af medianen. Derudover foretages der såkaldte synkronmålinger, hvor der for et større antal vandløbspunkter bestemmes medianminimum (data findes hos DMU og amterne). Denne størrelse anvendes i vurderingen af grundvandstilstrømningen til vandløbet. Typisk vil målingerne blive foretaget om sommeren og helst sensommeren, da man på denne måde kan få et godt billede af hvor og hvor meget tilstrømning der foregår fra eller til grundvandet. Ved at sammenholde informationerne fra synkronmålekampagner, som giver et øjebliksbillede med stor arealmæssig diskretisering, med de faste målestationer kan man fremstille kort over medianminimumsafstrømning for hele vandløbsoplande. Disse giver et godt billede grundvandstilstrømningen og dens variation i oplandet.

8.6 REFERENCER

Allerup, P., Madsen, H. og Vejen, F. (1998). Standardværdier (1961-90) af nedbørskorrekationer. DMI tech. rep. 98-10, København.

GEUS (1997). National vandressource model, Modelopstilling for Fyn. Rapport 1997/139 udarbejdet af Henriksen, H.J., Knudby, C.J., Rasmussen, P. og Nyegaard, P.

Makkink, G.F. (1957). Ekzameno de la formulo de Penman. Repr. Neth. J. Agric. Sci. 5, 290-305.

Mikkelsen, H.E. og Olesen, J.E. (1991). Sammenligning af metoder til bestemmelse af potentiel vandfordampning. Statens Planteavlsvforsøgs beretning nr. S2157.

Plauborg, F. og Olesen, J.E. (1991). Udvikling og validering af modellen MARKVAND til vandingsstyring i landbruget. Beretning nr. S 2113.

Refsgaard, J.C. (1981). The surface water component of an integrated hydrological model. SUSÅ H12. Miljøstyrelsen, SRVF, SJF, SNF og TR.

Scharling, M. (1999a). Klimagrid – Danmark. Nedbør, lufttemperatur og potentiel fordampning 20x20 og 40x40 km 10x10 km. Metodebeskrivelse. DMI tech. rep. 99-12.

Scharling, M. (1999b). Klimagrid – Danmark. Nedbør 10x10 km, ver. 2. Metodebeskrivelse. DMI tech. rep. 99-15.

Vejen, F., Madsen, H. og Allerup, P. (2000). Korrektion for fejlkilder på målinger af nedbør – Korrektionsprocenter ved udvalgte stationer 1989-1999. DMI tech. rep. 00-20.

Århus Amt (2000). Hydrologisk undersøgelse for Kasted, Århus Amt. Rapport udarbejdet af DHI – institut for vand & miljø, maj 2000.

Kapitel 9 STARTVÆRDIER, ANALYSE AF STARTVÆRDIERNES INDFLYDELSE PÅ BEREGNINGSRISULTATERNE

Adam Brun

Afdeling for Grundvand, Affald og Mikrobiologi, DHI - Institut for Vand og Miljø

Nøglebegreber: Initialbetingelser, startværdier, ikke-stationær, stationær

ABSTRACT: For at kunne påbegynde en beregning er det nødvendigt at specificere startsituationen. Dette gøres ved at specificere, hvilket trykniveau beregningscellerne har, når beregningen påbegyndes. Ved stationære simuleringer har startværdierne kun betydning for, hvor hurtigt modellen kan beregne den stationære løsning. Ved ikke-stationære beregninger vil startværdierne dels udtrykke et starttrykniveau, og dels indirekte angive den vandmængde, der er til rådighed ved starten af beregningen. Modellen kan anvendes til at beregne startværdierne, hvilket giver sikkerhed for, at modellen er i balance, når beregningen påbegyndes. Alternativt kan der indlægges interpolerede felldata.

9.1 HVILKEN BETYDNING HAR STARTVÆRDIERNE FOR STATIONÆRE OG IKKE STATIONÆRE SIMULERINGER

En numerisk løsning af grundvandsstrømning beregner, hvorledes trykniveaufordelingen i det numeriske net ændrer sig fra ét tidsskridt til det næste tidsskridt som funktion af den initiale situation og eventuelle randbetingelser. Beregningsresultaterne fra dette tidsskridt anvendes dernæst som udgangspunkt for beregningerne af det følgende tidsskridt. Det er således muligt at beregne, hvordan systemet opfører sig, hvis udgangspunktet er kendt. For at påbegynde denne kæde af beregningstrin er det nødvendigt at specificere initiale betingelser, såkaldte startværdier. Det er vigtigt at skelne mellem randbetingelser og startværdier. Startværdier angiver initialværdier for de beregningsceller, hvor trykniveauet skal beregnes. Randbetingelserne angiver den stedlige og tidslige variation i trykniveauet, hvor trykniveauet forudsættes kendt.

Ved beregning af en stationær løsning vil startværdierne ikke spille ind på det endelige resultat, dog vil mellemregningerne blive hurtigere, hvis startværdierne fastsættes, så de tilnærmelsesvis ligner den endelige løsning. I værste fald kan specifikation af helt forkerte startværdier føre til konvergensproblemer for den stationære løsning, hvorved beregningsresultaterne mister deres værdi.

Ved ikke-stationære beregninger har startværdierne meget indflydelse, specielt på vandbalancen. Startværdierne angiver trykniveauet og dermed vandindholdet for modellen. Hvis startværdierne repræsenterer resultatet af en tør sommer eller en periode med meget indvinding, vil trykniveauet være lavt, og modellen vil ikke indeholde så meget vand. Efter en periode vil dette udjævne sig, idet startværdierne vil få mindre og mindre indflydelse, og beregningsresultatet vil være mere og mere afhængigt af de givne randbetingelser. Længden af denne periode kan kun bestemmes ved at prøve med forskellige startværdier. Efterfølgende kontrolleres det, i hvor lang en periode der kan registreres ændringer i resultatet mellem to beregninger udført med forskellige startværdier.

9.2 METODER TIL FASTSÆTTELSE AF STARTVÆRDIER

Principielt kan der anvendes to metoder til fastsættelse af startværdier for trykniveauet. Enten kan man indlægge interpolerede feltdata, eller man kan lade modellen beregne startværdier. Hvis man anvender feltdata, vil startværdierne ikke være i balance med det hydrologiske system, modellen udgør. Modellen vil anvende de første tidsskridt til at svinge sig ind, således at der tages hensyn til fordeling af hydraulisk ledningsevne, randbetingelser osv. I denne startperiode vil resultaterne ikke være gyldige. Den interpolering, der anvendes for at indlægge spredte feltdata i beregningsnettet, tager jo ikke hensyn til variationer i hydraulisk ledningsevne og randbetingelserne.

9.3 METODER TIL INDKØRING AF "MODELLEN"

For at sikre gode startværdier er det en fordel at lade modellen dynamisk arbejde sig frem til startværdierne. Dette gøres ved at lade simuleringen starte før den periode, der ønskes analyseret. Denne indkøringsperiode kan lede til to principielt forskellige startsituationer for analyseperioden ved enten at lade randbetingelserne være konstante i tiden eller indbygge en periodisk variation.

Hvis randbetingelserne holdes konstante i tiden i indkøringsperioden, vil indkøringsperioden resultere i, at startgrundlaget for den egentlige beregning er en stationær situation, så at sige i ligevægt med randbetingelserne.

Hvis der forekommer periodiske variationer i randbetingelserne, kan det være en fordel at indbygge dette i indkøringsperioden. Dette vil resultere i startværdier for analyseperioden, der er dynamiske og dermed danner et bedre grundlag for beregningen af analyseperioden.

Der kan ikke gives præcise anbefalinger om, hvor lang tid en indkøringsperiode skal vare. Det er vigtigt at både trykniveauerne og afstrømningerne er kommet på plads. Der er dog angivet vejledende værdier i nedenstående tabel 9.1.

Tabel 9.1 Vejledende værdier for længde af opvarmningsperiode

Modeltype	Elasticitet og kapacitet*	Opvarmningsperiode
Grundvand, artesiske magasin	1 mm/m	1-2 måneder
Grundvand, frit magasin	10-300 mm/m	6-24 måneder
Integreret hydrologisk model	-	1-4 år

*angivelse af den "magasinerings", der er i systemet (i mm pr m trykniveauændring) før modellen ændres fra startværdierne til værdier, der er i hydraulisk balance med randbetingelserne. Det er en noget arbitrær størrelse og vil variere fra model til model samt internt i hver enkelt model.

9.4 BESTEMMELSE AF STARTVÆRDIERNES INDFLYDELSE I DEN KONKRETE MODELOPSÆTNING

Startværdiernes indflydelse kan kun kvantificeres ved beregninger udført for den specifikke model med varierende startværdier. Generelt kan man optegne en teoretisk kurve for betydningen af randbetingelser i forhold til startværdier. I den første periode af simuleringen vil startværdierne være mest afgørende. Efterhånden som beregningen skrider frem, vil randbetingelserne langsomt overtage for til sidst at være helt afgørende. Denne situation svarer til den stationære beregning, hvor startværdierne ikke har indflydelse på resultatet. Hvis betydningen ønskes kvantificeret, må dette gøres gennem beregninger gennemført med forskellige startværdier.

9.5 REFERENCER

Anderson, M.P. and W.W. Woessner (1992): Applied Groundwater Modelling. Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.

Kapitel 10 KALIBRERING AF STRØMNINGSMODEL

Torben Obel Sonnenborg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Kalibreringsprotokol, observationsdata, kalibreringskriterier, identificerbarhed, entydighed, parameterestimation, sensitivitetsanalyse, parameterusikkerhed

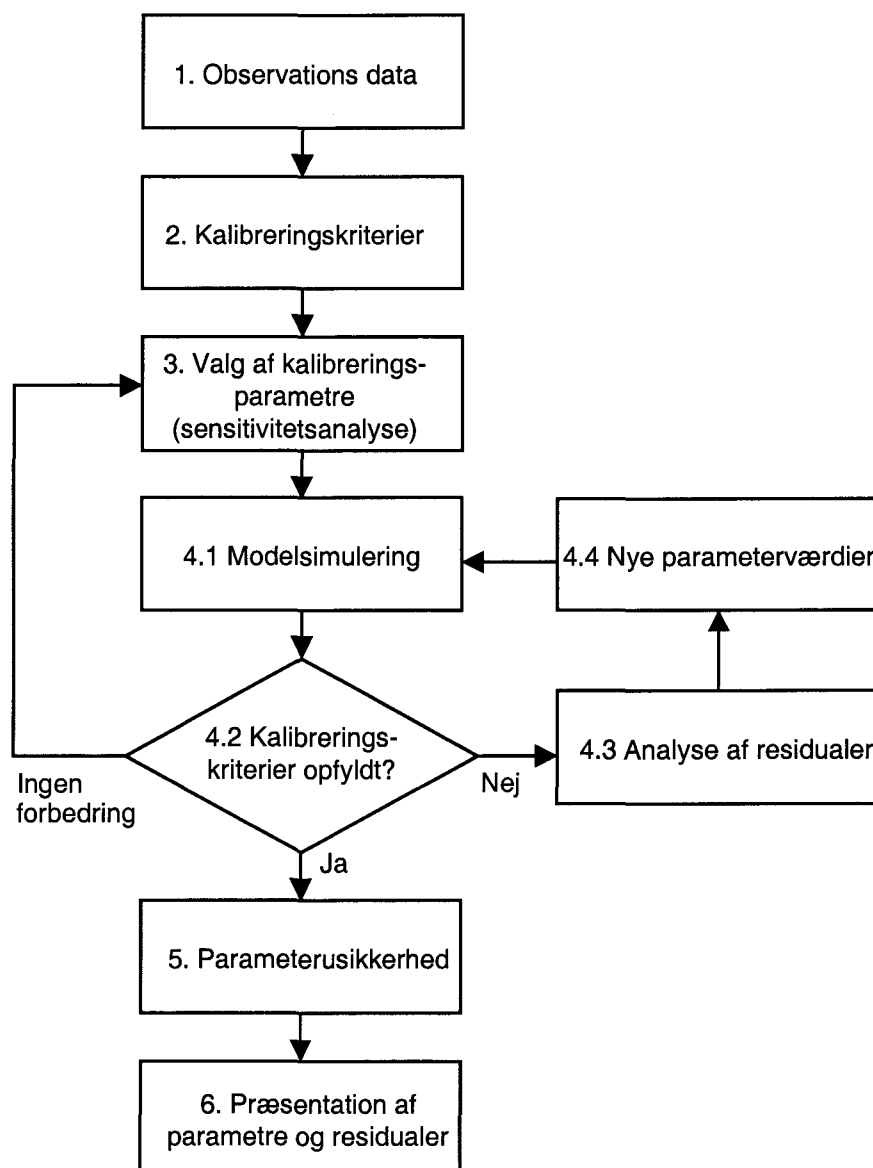
ABSTRACT: Kalibrering er en af de mest tidskrævende faser i modeludviklingen. Samtidig er det et af de mest kritiske trin i udviklingen af en pålidelig model. Det er derfor af afgørende betydning, at kalibreringsprocessen struktureres hensigtsmæssigt, hvis en optimal model skal opnås. I dette kapitel skitseres det, hvordan kalibreringsprocessen kan organiseres og kvantificeres. De første tre faser i kalibreringsprocessen består i valg af kalibreringsdata, kalibreringskriterier og kalibreringsparametre. Dernæst angives retningslinier for selve estimationen af parametre, hvor der er taget udgangspunkt i anvendelse af manuel kalibrering, men hvor også automatisk kalibrering introduceres. Endelig skitseres det, hvordan usikkerheden på kalibreringsparametrene kan vurderes, og det beskrives, hvordan resultaterne af kalibreringsprocessen kan præsenteres.

10.1 INDLEDNING

Anvendelsen af en numerisk model forudsætter, at parametrene, som indgår i de diskretiserede ligninger, f.eks. strømningsligningen (1.9), kvantificeres. I tilfældet med tredimensional ikke-stationær grundvandsstrømning, lign. (1.9), skal der for hvert numerisk element fastsættes værdier for de hydrauliske egenskaber udtrykt ved parametrene K_x , K_y , K_z , og S_s . Desuden skal såvel ydre som indre randbetingelser (se kapitel 6) fastlægges. Antallet af numeriske elementer vil stort set altid overstige antallet af målinger af de hydrauliske parametre, der er til rådighed i et givent område, og det er derfor nødvendigt at estimere parametrenes værdi. Dette kan gøres ud fra (1) de tilgængelige målinger af de hydrauliske parametre (f.eks. hydraulisk ledningsevne) eller (2) observerede værdier af systemets tilstandsvariable (f.eks. hydraulisk trykniveau).

Den første metode kan gennemføres selv om der ikke er tilstrækkeligt med målinger af de hydrauliske egenskaber til at dække hele det numeriske net. Ved interpolation ud fra målingerne kan der etableres værdier over hele området. Denne metode vil pga. primært to effekter ofte resultere i for store afvigelser mellem observeret og simuleret tilstandsvariable (residualer). For det første varierer geologien sjældent jævnt mellem målepunkterne, og der er derfor stor sandsynlighed for, at heterogeniteter overses med denne metode. For det andet resulterer skalaeffekter i, at det er vanskeligt at importere feltmålinger af hydrauliske egenskaber direkte til den numeriske model.

Det bedste resultat opnås normalt, hvis modellens parametre estimeres vha. den anden metode, dvs. ud fra observationer af eksempelvis hydraulisk trykniveau. I dette tilfælde justeres parameter-værdierne med det formål at opnå en god overensstemmelse mellem målte og simulerede tilstandsvariable. Denne proces, hvor der estimeres parametre og randbetingelser, som gør strømningsmodellen i stand til at reproducere f.eks. trykniveau- og vandføringsmålinger med en på forhånd given præcision, benævnes modelkalibrering eller blot kalibrering. I kalibreringsprocessen tilpasses parametrene med det formål at minimere residualerne (afvigelsen mellem observeret værdi og modelresultat). Herved opnås parameterestimer, som gør modellen i stand til at reproducere systemets opførsel i kalibreringsperioden (tidsperioden hvorfra data, der anvendes til kalibrering, stammer fra), med forhåbentlig acceptabel præcision. I den efterfølgende valideringsfase (kapitel 11) vurderes det, om modellen også er i stand til at forudsige det fysiske systems opførsel i valideringsperioden.



Figur 10.1 Kalibreringsprotokol, hvor de enkelte trin i kalibreringsprocessen er opført.

Kalibreringen er et af de sværeste skridt i opstilling af en operationel grundvandsmodel, og vil ofte være den fase i modeludviklingen, som kræver det største tidsforbrug. Kalibreringsprocessen kan være vanskelig og frustrerende at gennemføre, specielt hvis der ikke følges en stringent fremgangsmetode. Figur 10.1 viser, hvorledes kalibreringen af en grundvandsmodel med fordel kan gennemføres. Den såkaldte kalibreringsprotokol angiver de skridt, der tages i kalibreringen af modellen. Observationsdata er en basal forudsætning for at kunne gennemføre en kalibrering. Det er vigtigt dels at inddrage de relevante data (typisk pejledata og afstrømningsdata), dels at vurdere usikkerheden på de anvendte observationer. Det næste skridt i kalibreringsprocessen består i at opstille både kvantitative og kvalitative kriterier for, hvor præcist modellen skal reproducere de observerede værdier. Derefter skal det analyseres, hvilke modelparametre, der skal udvælges som kalibreringsparametre. Til dette formål vil både en analyse af det fysiske system samt en sensitivitetsanalyse af potentielle kalibreringsparametre med fordel kunne udføres. Efter de tre indledende faser er gennemført, kan selve estimationen foretages (4.1 – 4.4 i figur 10.1). Denne iterative proces forløber ved successivt at ændre

værdierne af kalibreringsparametrene. Ændringerne foretages på basis af en analyse af residualerne, enten ud fra en fysisk indsigt i det modellerede system eller ved gennemførelse af en detaljeret sensitivitetsanalyse. Estimationsprocessen kan afsluttes med en analyse af usikkerheden på de estimerede kalibreringsparametre. Endelig skal resultatet af kalibreringen rapporteres, hvilket inkluderer præsentation og vurdering af optimerede parametre og simuleringresultater. I de følgende afsnit vil hvert element i kalibreringsprotokollen blive gennemgået.

10.2 OBSERVATIONSDATA

I dette afsnit beskrives udvælgelse og kvalitetsvurdering af målinger fra det betragtede hydrologiske system, som modellen kalibreres efter. Data, der anvendes som input til modellen (nedbør, temperatur, fordampning, etc.), vil ikke blive behandlet her, idet der henvises til kapitel 8.

10.2.1 Udvalgelse af observationsdata

I arbejdet med strømningsmodeller vil det primært være målinger af hydraulisk trykniveau og vandløbsvandføring, der kan inkluderes i kalibreringsprocessen. Hvis den umættede zone indgår i modellen, vil målinger af vandindhold måske være til stede. I sjældne tilfælde vil der også være mulighed for at inddrage målinger af grundvandets alder samt grundvandets strømningsretning og -hastighed. Da de sidstnævnte data kun undtagelsesvis er til rådighed, vil der her blive fokuseret primært på observationer af hydraulisk trykniveau og vandføring. I det følgende behandles udvælgelsen af kalibreringsdata, dvs. hvilke observationer af trykniveau og vandføring, der skal inkluderes i estimationen. Både den tidslige og rumlige fordeling af de tilgængelige observationsdata vil blive behandlet.

I første omgang er det hensigtsmæssigt at analysere det foreliggende datasæt for systematiske fejl. Trykniveaumålinger kan være påvirket af effekter, som ikke er inkluderet i den opstillede model. Eksempelvis kan visse observationer være influeret af prøvepumpningsforsøg, af invindingsboringer som er nedlagt, m.m. Det anbefales derfor, at de tilgængelige data evalueres, f.eks. vha. konturplot eller anden visuel teknik til at illustrere det generelle trykniveaubillede i området.

Når der anvendes en stationær grundvandsmodel, er udvælgelse af repræsentative data langt fra trivielt. Hvis tidsserier af det hydrauliske trykniveau er til rådighed, skal der foretages en midling af trykniveauet, der afspejler, hvilken slags stationær model der er opstillet. Stationære tilstande vil kun i meget sjældne tilfælde optræde i virkelige grundvandsmagasiner, og det skal derfor vælges, hvilken situation, der ønskes en model for. Hvis der fokuseres på vandudvekslingen mellem grundvand og vandløb med det formål at analysere minimumsvandføringen i vandløb, vil det muligvis være mest hensigtsmæssigt at basere kalibreringsværdien på en analyse af årlige minimumsværdier af det hydrauliske trykniveau. Hvis der derimod ønskes en analyse af de gennemsnitlige forhold i reservoiret, vil middelværdien af det målte trykniveau sandsynligvis være en mere repræsentativ kalibreringsværdi. Hvilke typer data, der skal inddrages, og hvilken slags midling, der skal foretages, afhænger med andre ord af formålet med modelleringsarbejdet.

Vandføringsdata for grundvandszonen er ikke direkte tilgængelig, men der kan opnås et indirekte mål for grundvandets udveksling med vandløb, her benævnt grundvandstilstrømning, ved at inddrage værdier af vandløbenes sommervandføringer, hvor den mindste vandføring i vandløbet optræder. Hvis det ikke har regnet i længere tid forud for målingen, kan det for visse grundvandsystemer forsvares at fortolke denne vandføring udelukkende som et resultat af vandstrømning gennem den mættede zone til vandløbet (samt evt. spildevandsbidrag eller andre tilledninger). Dvs. bidrag fra overfladeafstrømning, interflow, drænvandsafstrømning samt udstrømning fra søer og vådområder forudsættes at være neglige i forhold til grundvandstilstrømningen.

Grundvandstilstrømningen varierer over året, og det er derfor vigtigt at gøre sig klart, at den målte minimumsvandføring repræsenterer den lave ende af grundvandstilstrømningens variationsområde. Hvis der arbejdes med en stationær model, der skal simulere sommerperioden med lille nettonedbør, vil det være hensigtsmæssigt at anvende medianminimum som er et udtryk for det

sandsynlige minimumsflow. Derimod vil medianminimum ikke repræsentere den gennemsnitlige grundvandstilstrømning, og medianminimumsværdier kan derfor være farlige at anvende direkte i en stationær model, hvor reservoirets gennemsnitlige forhold ønskes belyst.

Hvis det skal være muligt at estimere rumligt distribuerede parametre, er det vigtigt, at der er observationsdata til rådighed i hele det modellerede område. Ideelt set er det mest fordelagtigt, hvis kalibreringsdata fordeler sig jævnt indenfor området. I realiteten vil der altid være flere data til rådighed i nogle områder end andre. Det kan derfor være hensigtsmæssigt at eliminere nogle observationer i områder, hvor densiteten af data er stor. Herved undgås, at visse områder tillægges meget større vægt end andre, når kalibreringen gennemføres, idet modellen vil være tilbøjelig til at vurdere kalibreringsresultatet ud fra nogle numeriske kriterier (se afsnit 10.3). Desuden vil informationsmængden pr. observation typisk være lille i områder med høj koncentration af data. Det vil derfor være relativt omkostningsfrit at se bort fra observationer i pågældende område.

Hvad enten der simuleres stationært eller ikke-stationært kan det anbefales, at både trykniveau og vandføring inddrages i kalibreringen. Jo flere typer data, der anvendes, des større chance er der for at undgå problemer med manglende identificerbarhed (afsnit 10.4.2) og entydighed (afsnit 10.5). Desuden kan indragelsen af flere datatyper resultere i en reduktion af usikkerheden på de estimerede parametre, se f.eks. Christensen et al. (1998).

10.2.2 Usikkerhed på observationsdata

Det anbefales, at kvaliteten (usikkerheden) af kalibreringsdata vurderes, inden parameterestimationen påbegyndes. Formålet med at kvantificere usikkerheden på kalibreringsdata er for det første at opnå et mål for, hvor præcist modellen i bedste fald kan forventes at reproducere data, dels at opnå et objektive kriterium for, hvorledes data af samme type skal vægtes indbyrdes og endnu vigtigere, hvordan data af forskellig type skal vægtes i forhold til hinanden.

Observationsdata vil altid være behæftet med usikkerhed. I nærværende sammenhæng vil faktorer, som resulterer i ikke systematiske afvigelser mellem målinger og modelresultater blive fortolket som usikkerhed på observationsdata. Målefejl er en af årsagerne til en del af denne usikkerhed, mens uoverensstemmelse mellem naturens kontinuerte variable og modellens diskrete variable er en anden årsag til afvigelser mellem observationer og modelprediktioner. Effekterne, som beskrives i dette afsnit, vil i middel være nul og introducerer derfor ikke nogen systematisk fejl i modelarbejdet. I det følgende vil usikkerheden på trykniveau- og vandføringsobservationer blive kvantificeret. Der sigtes på at bestemme en størrelsesorden for usikkerheden, idet en meget nøjagtig kvantificering kun undtagelsesvist kan lade sig gøre. Desuden er det ikke nødvendigt at fastlægge usikkerheden med speciel høj præcision for at kunne vurdere kvaliteten af observationerne.

Observationer af hydraulisk trykniveau

Trykniveauobservationer kan være behæftet med *målefejl*. Selve pejlingen i boringen kan være fejlbehæftet, idet både tryktransducere og vandspejlsmåleudstyr har en endelig præcision. Denne fejl vil under normale omstændigheder være relativ beskeden (få centimeter). Større fejl kan opstå pga. manuelle aflæsningsfejl eller tastefejl. Desuden kan det målte vandniveau i boringen afvige fra den sande værdi i magasinet pga. delvis tilstopning af eller omkring filtersætningen. Da barometertrykket sjældent indgår eksplicit i grundvandsmodeller, og atmosfæriske lufttryksændringer derfor ikke beskrives af modellen, kan barometereffekter også introducere en fejl på det måle trykniveau. Samlet vil målefejlene typisk resultere i en standardafvigelse på observationsværdien på 5 – 30 cm.

Koten, hvortil dybden til vandspejlet i boringen relateres (*målepunktskoten*), kan være behæftet med betydelig usikkerhed. Hvis terrænkoten er bestemt ud fra et topografisk kort med skalaen 1:25.000, vil intervallerne mellem konturlinierne være 2.5 m med en præcision på 0.5 m. Medtages boringens usikre placering på kortet, kan den samlede standardafvigelse på målepunktskoten være på 1 – 2 m. Hvis terrænkoten er bestemt vha. GPS vil usikkerheden typisk være af størrelsesorden cencimeter.

Skalaeffekter medfører en yderligere usikkerhed på data. Skalaeffekter opstår, fordi der anvendes numeriske celler af endelig størrelse til beskrivelse af den kontinuerte fysiske virkelighed. Eksempelvis kan der være uoverensstemmelse mellem boringens filtersatte interval og den *vertikale diskretisering* i modellen. Både hvis filterintervallet er mindre end lagtykkelsen men specielt, hvis det er større end lagtykkelsen eller den vertikale cellestørrelse, vil der opstå fejl ved sammenligningen af observeret og simuleret trykniveau. Hvis boringen eksempelvis er filtersat over to sandmagasiner adskilt af et lavpermeabelt lerlag, vil det være vanskeligt at relatere det målte trykniveau til resultater fra en model, der opløser den geologiske lagserie. Normalt vil filterets midtpunkt blive anvendt til at afgøre, hvilken celledes trykniveau der skal repræsentere det observerede. Dette valg introducerer en fejl, som er svær at kvantificere i det generelle tilfælde. Fejlen vil bl.a. afhænge af faktorer som filterlængden, den vertikale diskretisering og den geologiske opbygning af reservoiret.

Observationsboringens horisontale placering kan være behæftet med usikkerhed pga. unøjagtig opmåling. Hvis placeringen er vurderet ud fra kort, kan denne fejl være betydelig. Desuden vil boringens placering kun sjældent være sammenfaldende med midtpunktet af en numerisk celle. Det kan derfor være nødvendigt at interpolere mellem nærliggende celler, for at opnå det bedst mulige estimat af trykniveauet ved boringen. Derved introduceres en *interpolationsfejl*, som vil afhænge af den anvendte horisontale diskretisering og gradienten på trykniveauet i området.

Topografiens variation indenfor de numeriske celler kan give anledning til afvigelser mellem observeret og simuleret trykniveau. Trykniveauet i specielt de terrænnære frie magasiner vil være følsomt overfor variationer i topografien. Standardafvigelsen på det hydrauliske trykniveau vurderes generelt at afhænge af topografiens variation, den anvendte diskretisering og det frie magasinets ledningsevne, men det er svært at kvantificere fejlen i det generelle tilfælde. Ved opsætning af DK-model Fyn (Henriksen et al., 1997), hvor der benyttes cellestørrelser på 1×1 km, blev der beregnet en standardafvigelse på 4.9 m på cellernes middellag. Der var derfor en betydelig usikkerhed på simuleret trykniveau i de øverste lag af modellen.

Den sidste skalafejl skyldes den *geologiske heterogenitet* indenfor de numeriske celler, som det i en deterministisk grundvandsmodel er umuligt at beskrive eksplicit, da hver celle skal tilskrives ét sæt hydrauliske parametre. Ifølge Gelhar (1986) er usikkerheden på trykniveauet, som skyldes ikke modelleret heterogenitet, en funktion af gradienten på det hydrauliske trykniveau, variansen på logtransformeret hydraulisk ledningsevne samt korrelationslængden for samme størrelse. Det kræver derfor et detaljeret kendskab til den rumlige variabilitet af den hydrauliske ledningsevne, som sjældent er tilgængelig i praksis, at kvantificere denne type fejl. Imidlertid vil det undertiden være muligt at give et kvalificeret skøn på den hydrauliske ledningsevnes geostatistiske egenskaber ved at inddrage erfaringsværdier fra sammenlignelige områder. Alternativt kan fejlen vurderes, hvis trykniveaudata fra tætstående boringer er til rådighed.

Tidsskalaeffekter kan være en fejlkilde, hvis der anvendes en stationær grundvandsmodel. Anvendelse af observationsdata, som repræsenterer ikke-stationære tilstande, vil ved brug af en stationær model resultere i afvigelser mellem observeret og simuleret trykniveau, som ikke kan elimineres. Hvis tidsserier af trykniveaumålinger er til rådighed, kan data analyseres, som beskrevet i afsnit 10.2.1, og en værdi, der repræsenterer den stationære tilstand, som ønskes beskrevet, kan beregnes. Herved kan den ikke-stationære fejl minimeres til et niveau, som er bestemt af tidsseriens længde og den anvendte analysemetode. I mange tilfælde vil der imidlertid kun være enkelte eller få målinger til rådighed fra de fleste af de installerede boringer, og i dette tilfælde vil det være svært at filtrere den ikke-stationære effekt fra. Da målingerne kan indeholde værdifuld information om trykniveaubilledet i området, vil de ofte blive anvendt i kalibreringen alligevel. Hvis trykniveaudata i de tilgængelige boringer er fremkommet ved måling på tilfældige tidspunkter af året, vil det imidlertid være rimeligt at antage, at målingerne i gennemsnit repræsenterer et middeltrykniveau. Pga. sæsonvariationerne vil de pågældende data være behæftet med en betydelig usikkerhed, som kan kvantificeres vha. tidsserier af trykniveaumålinger fra det aktuelle område. Herved kan et estimat for årstidsvariationerne og dermed usikkerheden på datapunkterne skønnes. For Esbjergmodellen, se appendiks A, blev trykniveaudata fra Jupiterdatabasen, som indeholder mange boringer med kun én eller få målinger, anvendt. Ud fra tidsserier fra området blev trykniveauet vurderet at variere med ca. ± 1 m, svarende til en standardafvigelse på omkring en halv meter.

I nedenstående tabel ses en oversigt over de ovenfor beskrevne usikkerheder, hvor standardafvigelsen er anvendt til kvantificeringen. Yderligere er det forsøgt at beregne de enkelte usikkerhedsbidrag for hhv. Esbjergmodellen (Harrar & Henriksen, 1996, samt Appendiks A) og DK-model Fyn (Henriksen et al., 1997), i begge tilfælde for beregningslag 3, som er domineret af sandformationer. Variansen på log K er sat til hhv. 1 og 2 for Esbjerg og Fyn, og korrelationslængden, α , er for begge områder sat til 500 m.

Hvis fejlkilderne antages at være uafhængige, kan de enkelte bidrags varians (kvadratet på de tabulerede standardafvigelser) summeres, og den samlede standardafvigelse på observationsdata kan beregnes som kvadratroden af denne sum (vist i kolonnen længst til højre i tabel 10.1).

Tabel 10.1 Angivelse af standardafvigelse, s_{obs} (i m), på observationer af hydraulisk trykniveau. Δx betegner den horisontale diskretisering, og J er den hydrauliske gradient.

	Pejlefejl		Skalafejl		Ikke-stationaritet	Andre effekter ³⁾	Samlet usikkerhed
	Målefejl	Kote	Interpol.	Heterogen.			
Generelt	0.05–0.3	0 – 2	0.5 Δx J	$\alpha s_{\ln K} J$ ¹⁾	$\Delta h_t/2$ ²⁾	0 – 1	$\sqrt{\Sigma s^2}$
Esbjerg	0.1	1.5	0.5	1.0	0.5	0.25	2.0
Fyn	0.1	1.5	1.5	2.1	0.5	0.25	3.0

1) $s_{\ln K}$ er standardafvigelsen på log K. α er korrelationslængden for log K (hvis korrelationslængden er større end den anvendte diskretisering, Δx , er $\alpha = \Delta x$).

2) Δh_t angiver amplituden på sæsonvariationerne i hydraulisk trykniveau.

3) Inkludere effekter som vertikal skalafejl og variationer i topografi.

Christensen (1997) giver et eksempel på kvantificering af fejlen på hydraulisk trykniveau for et dansk (østjysk) grundvandsmagasin. De anvendte data opdeles i fire grupper afhængig af observationsfejl og geologisk heterogenitet på lokaliteten, hvor boringen er installeret. Desuden kan man i samme publikation finde et eksempel på den hydrauliske ledningsevnes geostatistiske parametre på en skala af størrelsesorden 30 km. I Christensen et al. (1998) kan fejlen på trykniveauet for et magasin på Sjælland findes.

Observationer af vandløbsvandføring

Tidsserier af vandføringsdata er behæftet med usikkerhed hidrørende fra kilder såsom registrering af vandstand, vingemålinger af strømningshastighed og efterfølgende transformation til vandføring, fastlæggelse af Q-H relationen (sammenhængen mellem vandføringen Q og vandstanden H) for det grødefri vandløb samt bestemmelse af variationer i vandføringsevnen pga. grødevækst/skræring og sedimenttransport (ændringer i Q-H relationen med tiden).

Vandføringsmålinger, der er udført vha. målinger af strømningshastigheder i veldefinerede tværsnit, er behæftet med en relativ lille *målefejl* (5%). Større fejl vil der være på vandføringsdata, der er bestemt ved måling af vandstand i vandløbet og efterfølgende konverteret til vandføring vha. *Q-H-kurver*. Usikkerheden på Q-H relationen vil blive overført til usikkerhed på beregnet vandføringsværdi, typisk af størrelsesorden 10% (Blicher, 1991).

Usikkerheden på *medianminimum* ved faste målestationer vil afhænge af længden af tidsserien, der er til rådighed til beregningen af værdien, samt af spredningen på data. Baseret på analyse af årsminima fra 10 danske stationer (tidsserier af 65 års varighed) finder Bjarnov (1987) frem til følgende sammenhæng mellem medianminimum, q , og standardafvigelsen på årsminimum, s_q ,

$$s_q = 0.495 + 0.088q \quad (10.1)$$

hvor både s_q og q er i enheden l/s/km² (specifik afstrømning). Hvis årsminimum antages at være normalfordelt vil standardafvigelsen på medianminimum, s_q , approksimativt kunne udtrykkes som

$$s_{\bar{q}} = \frac{s_q}{\sqrt{n}} = \frac{0.495 + 0.088q}{\sqrt{n}} \quad (10.2)$$

hvor n er antallet af årsminima, hvorpå analysen bygges. Hvis anbefalingerne fra Jensen (1993) følges, er $n = 20$. Ved anvendelse af ovenstående ligning (10.2) findes den relative usikkerhed på medianminimum ($s_{\bar{q}} / \bar{q}$) til hhv. 13% og 3% for medianminimumsværdier på 1 og 10 l/s/km², hvilket giver en ide om størrelsesordenen af usikkerheden på medianminimum ved referencestationer.

Synkronmålinger, der repræsenterer medianminimum, vil være behæftet med usikkerhed pga. korrektion ud fra en referencestation, dvs. en fast målestation med en tidsserie på 20 år eller mere. Analysen antager, at vandføringen, hvor synkronmålingen er foretaget, varierer på samme måde som vandføringen ved referencestationen. Pålideligheden af denne fremgangsmåde vil naturligvis afhænge af, hvor godt denne antagelse er opfyldt, og usikkerheden på medianminimumsværdier baseret på synkronmålinger vil derfor være betydelig større end usikkerheden på medianminimum ved referencestationer.

Skalaeffekter har også indflydelse på vandføringsdata. Detaljeringsgraden, hvormed et vandløb kan repræsenteres i en numerisk model, vil afhænge af den anvendte diskretisering. Eksempelvis vil det ikke være muligt at repræsentere vandløb med et opland, der har mindre udstrækning end cellestørrelsen i det numeriske net (Refsgaard, 1997). Desuden kan den geometriske repræsentation af vandløbet afhænge af den numeriske cellestørrelse. De hydrauliske parametre, der beskriver vandudvekslingen mellem vandløb og hhv. grundvandszonen, overfladekomponenten og umættet zone (eksempelvis vandløbslækagekoefficient, overfladeruheid, infiltrationskapacitet) vil være påvirket af skalaeffekter. Skalaeffekten vurderes at resultere i en usikkerhed på vandføringsdata, der afhænger af forholdet mellem arealet af de numeriske celler og oplandsarealet til vandføringsstationen. Hvis dette forhold går mod 1, vil usikkerheden gå mod ∞ . Christensen et al. (1998) giver et eksempel på vurdering af usikkerheden på vandføringsdata for et dansk opland.

Anvendelse af usikkerhedsestimater

Summen af ovenstående fejlkilder udgør teoretisk set et mål for, hvor stor en afvigelse der kan forventes mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau (eller grundvandstilstrømning). Det kræver imidlertid, at procesbeskrivelser, den numeriske formulering, randbetingelser, m.m. er fejlfrie. Desuden kræver det, at de hydrauliske parametre kendes i hvert enkel celle i det numeriske net, hvilket aldrig er tilfældet for grundvandsmagasiner. Foruden observationsfejlen introduceres der dermed en modelfejl, som skyldes unøjagtigheder i det anvendte ligningssystem, diskretiseringsfejl, de anvendte randbetingelser og de anvendte hydrauliske parametre. Det er denne modelfejl, der kan minimeres ved passende valg af bl.a. modelparametre. Observationsfejlen angiver en nedre grænse for, hvor lille afvigelse der i gennemsnit kan opnås mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel (her normalt trykniveau). De såkaldte kalibreringsmål (på engelsk: *target*), som er et udtryk for, hvor præcist det kan forventes, at modelresultaterne beskriver observationsværdierne, er derfor ofte givet ved følgende relation (eksemplificeret ved trykniveauet): $h_{\text{obs}} \pm a \cdot s_{\text{obs}}$, hvor h_{obs} er det observerede trykniveau, a er en konstant, $a \in [1, 2, \dots]$, og s_{obs} er standardafvigelsen på trykniveauobservationen. Hvis simuleringsværdien falder indenfor kalibreringsmålet, må det betragtes som værende tilfredsstillende.

Når der inddrages mere end én observationstype, kan det være svært at vurdere, hvorledes afvigelser mellem observeret og simuleret værdi for de forskellige datatyper skal vægtes indbyrdes. Anvendelse af usikkerhedsestimater på observationsdata giver imidlertid en mulighed for at gøre denne vægtning mindre subjektiv. Hvis residualerne normeres med den estimerede standardafvigelse på observationsværdien, vil de vægtede residualer udtrykke, hvor præcist modellen simulerer målingerne i forhold til observationsusikkerheden. Hvis modellen er uden modelfejl vil de vægtede residualer i gennemsnit være lig 1.0. Da de vægtede residualer er dimensionsløse og af samme stør-

relsesorden uanset datatype, vil forskellige observationstyper umiddelbart kunne sammenlignes, hvis denne fremgangsmåde følges.

10.3 KALIBRERINGSKRITERIER

10.3.1 Typer af kriterier

Kvantitative kalibreringskriterier baseres hyppigt på et mål for den gennemsnitlige afvigelse mellem observeret og simuleret værdi, også benævnt en norm. Nedenfor er angivet nogle normer, som vægter de enkelte residualer på forskellig måde.

ME (mean error eller middelfejl) udtrykker den gennemsnitlige afvigelse mellem observeret ψ_{obs} og simuleret ψ_{sim} tilstandsvariabel

$$ME = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}) \quad (10.3)$$

hvor n er antallet af observationer. *ME* kan give et indtryk af, om der introduceres nogen overordnet fejl i modelresultaterne, dvs. om f.eks. trykniveauet simuleres generelt for lavt eller højt. Hvis $ME \rightarrow 0$, vil der globalt set ikke optræde systematiske fejl i modellen.

MAE (mean absolute error eller gennemsnitlig absolut fejl) beregner et gennemsnit af de absolutte residualer

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}| \quad (10.4)$$

I tilfælde hvor observationerne konsekvent simuleres for højt i et område og for lavt i et andet område, kan *ME* godt være tæt på nul og dermed indikere et godt kalibreringsresultat. *MAE* vil afsløre fejl af denne type og kan derfor være et vigtigt supplement til *ME* i vurderingen af den gennemsnitlige fejl.

RMS (root mean squared error eller middelværdien af kvadratafgivelsessummen) er det kriterium, der oftest anvendes til at måle den opnåede overensstemmelse mellem data og model

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i})^2} \quad (10.5)$$

Denne norm er et mål for spredningen på residualerne (lig standardafvigelsen, hvis $ME = 0$), og kan sammenlignes med den estimerede standardafvigelse på observationsdata.

SE (standard error, goodness of fit eller standardafvigelsen) er et direkte mål for modellens evne til at reproducere de observerede data

$$SE = \sqrt{\frac{1}{n-P} \sum_{i=1}^n w_i (\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i})^2} \quad (10.6)$$

hvor $w_i \in [0, 1]$ er vægtningen af observationsdata nr. i , og P er antallet af kalibreringsparametre. I en regressionsmæssig sammenhæng angiver $n - P$ antallet af frihedsgrader. Hvis vægtene w_i specificeres til den reciprokke værdi af variansen på observationerne ($w_i = 1/s_{obs,i}^2$) fås

$$SE = \sqrt{\frac{1}{n-P} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}}{S_{obs,i}} \right)^2} \quad (10.7)$$

og normen vil dermed tage hensyn til, at der kan være forskellig usikkerhed knyttet til observationsværdierne. Når samtlige modelfejl er elimineret og kun observationsfejl resterer, vil $SE \rightarrow 1$. SE giver dermed et direkte mål for, hvor godt de observerede værdier simuleres i forhold til usikkerheden på observationerne.

De ovenstående normer er primært anvendelige til at karakterisere den rumlige fordeling af afvigelsen mellem observeret og simuleret trykniveau (index i henfører til boringen). Hvis der i stedet fokuseres på ikke-stationære tilstande, hvor det er interessant at sammenligne tidsserier af observeret og simuleret trykniveau, er de anførte normer ikke hensigtsmæssige. Følgende analyse kan anvendes til at vurdere den dynamiske fejl: Hvis n angiver antallet af boringer og m er antallet af observationer i tidsserien, vil den samlede fejl kunne kvantificeres som

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (\psi_{obs,i}^j - \psi_{sim,i}^j)^2 \quad (10.8)$$

hvor index i og j angiver hhv. stedet og tiden. MSE er "mean squared error" eller middelværdien af de kvadrerede afvigelser. Ovenstående sum kan skrives som (pers. kom. Henrik Madsen, DHI, 2001)

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\bar{\psi}_{obs,i} - \bar{\psi}_{sim,i})^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [(\psi_{obs,i}^j - \bar{\psi}_{obs,i}) - (\psi_{sim,i}^j - \bar{\psi}_{sim,i})]^2 \quad (10.9)$$

hvor $\bar{\psi}$ angiver den tidsmidlede variabel. Den første sum kvantificerer forskellen mellem tidsmidlet observeret og simuleret trykniveau for de anvendte boringer, og svarer dermed til RMS , lign. (10.5). Den anden sum kvantificerer forskellen mellem hhv. det observerede og simulerede trykniveaus variation omkring deres respektive tidslige middelværdier. Den sidste sum giver dermed et mål for, hvor godt dynamikken i det pågældende system simuleres. For en enkelt boring kan den tidslige fejl derfor kvantificeres vha. følgende udtryk

$$RMST = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [(\psi_{obs}^j - \bar{\psi}_{obs}) - (\psi_{sim}^j - \bar{\psi}_{sim})]^2} \quad (10.10)$$

Den sidste norm, der gengives her, er R^2 (der også benævnes "model efficiency" eller "explained variance")

$$R^2 = \frac{\sum (\psi_{obs} - \bar{\psi}_{obs})^2 - \sum (\psi_{obs} - \psi_{sim})^2}{\sum (\psi_{obs} - \bar{\psi}_{obs})^2} \quad (10.11)$$

hvor $\bar{\psi}_{obs}$ er middelværdien af de observerede data. R^2 udtrykker, hvor stor en del af den totale variation i observationsdata, som bliver forklaret af modellen. R^2 er med andre ord et mål for tilpasningsgraden af den optimerede model. R^2 kan maksimalt blive 1.0, hvilket er udtryk for en perfekt overensstemmelse mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel, og er ubegrænset nedadtil.

Hvis R^2 bliver mindre end 0.0, giver middelværdien af de observerede data en bedre beskrivelse af data end modellen gør, og der er i dette tilfælde grund til at reformulere modellen. R^2 anvendes ofte til kvantificering af overensstemmelsen mellem tidsrækker af observeret og simuleret tilstandsvariabel, typisk vandløbsafstrømning.

10.3.2 Valg af nøjagtighedskriterier

Det er hensigtsmæssigt at opstille kriterier for, hvor præcist modellen skal kunne reproducere kalibreringsdata, før estimationsprocessen påbegyndes. Herved sikres det, at modellen opnår en kvalitet, som er i overensstemmelse med formålet med modelarbejdet. Samtidig sikrer klare kalibreringskriterier, at modelløren ved, hvad målet med estimationsarbejdet er, og hvornår modellen kan betragtes som være færdigkalibreret.

Både kvantitative og kvalitative kriterier kan med fordel specificeres. De kvantitative kriterier kan opdeles i en vurdering af den gennemsnitlige fejl og spredningen på residualerne. Den gennemsnitlige fejl skal generelt være tæt på nul og kan vurderes vha. ME . Det er sværere at opnå præcise resultater, hvis trykniveauet ændrer sig meget inden for korte afstande (dvs. i områder med store gradienter). Samtidig vil en model med et givent fejlniveau simulere strømningsmønsteret bedre i områder, hvor der optræder store forskelle i trykniveau end i områder med små forskelle i trykniveau. Det er derfor rimeligt at vurdere den gennemsnitlige fejl i forhold til det totale trykniveaufald i modelområdet.

Spredningen på residualerne kan med fordel formuleres ud fra usikkerheden på observationsdata, se afsnit 10.2.2. Standardafvigelsen på det hydrauliske trykniveau estimeret i tabel 10.1 inkluderer effekten af både unøjagtige målemetoder og hydrogeologiske karakteristika såsom den hydrauliske gradient og den geologiske heterogenitet. Det er derfor relevant at relatere forskellen mellem observeret og simuleret trykniveau til den estimerede standardafvigelse på observationerne. Dette gøres direkte ved brug af lign. (10.7) og kan alternativt gøres ved at skalere RMS med s_{obs} , hvis standardafvigelsen er ens for de indgående observationer. Hvis der ikke er foretaget en analyse af observationernes usikkerhed, kan spredningen på residualerne relateres til det totale trykniveaufald i området.

Hvis der simuleres ikke-stationært vil der ud over kriterier for fordelingen af den rumlige fejl være behov for vurdering af, hvor godt dynamikken reproduceres. Til dette formål kan størrelsen $RMST$, lign. (10.10), benyttes, og det vil være rimeligt at relatere den beregnede $RMST$ -værdi til amplituden på de sæsonmæssige variationer i observeret trykniveau.

I tabel 10.2 er der angivet alternative kriterier for overensstemmelsen mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau.

Foruden de kvantitative krav opstillet ovenfor, kan der angives kvalitative kriterier. Følgende tre kriterier vil være fornuftige: (1) De estimerede parametre skal have realistiske værdier. I det efterfølgende afsnit (afsnit 10.4.1) vil det blive skitseret, hvorledes fysisk plausible intervaller for kalibreringsparametrene kan opstilles. (2) Residualerne skal være fordelt fornuftigt både i tid og sted. Selv om kriterium nr. 1 i tabel 10.2 er opfyldt for området under ét, kan der sagtens være områder eller tidsrum, hvor modellen konsekvent simulerer for store eller små værdier. Den type systematisk fejlmodellering skal så vidt muligt elimineres fra modellen. (3) Områdets hydrogeologiske karakteristika skal reproducere af modellen. Det kan eksempelvis kræves, at modellen er i stand til at simulere strømningsretning, retningen af gradienten over dybden eller beliggenheden af grundvandsskel korrekt.

Tabel 10.2 Kriterier for overensstemmelsen mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau. β_i ($i = 1,2,3,4$) er nøjagtighedskriterier.

Nr.	Kriterium	Kommentarer
1	$\frac{ME}{\Delta h_{\max}} \leq \beta_1$	Vurdering af middelfejl. Δh_{\max} er forskellen mellem maksimum og minimum hydraulisk trykniveau i området. Dette kriterium udtrykker, at den globale under- eller overprediktion i forhold til den globale trykniveauforskell i modelområdet skal være mindre end β_1 .
2	$\frac{RMS}{s_{obs}} \leq \beta_2$	Vurdering af spredningen på residualerne i forhold til standardafvigelsen på observationsværdierne. Anvendes, hvis usikkerheden på observationsdata er kvantificeret (her angivet ved standardafvigelsen s_{obs}), hvis der kun indgår én datatype i kriteriet og alle data er behæftet med samme usikkerhed.
3	$SE \leq \beta_2$	Vurdering af spredningen på residualerne i forhold til standardafvigelsen på observationsværdierne. Hvis der er variabel usikkerhed på de inkluderede observationsdata kan dette kriterium anvendes.
4	$\frac{RMS}{\Delta h_{\max}} \leq \beta_3$	Vurdering af spredningen på residualerne i forhold til trykniveauvariationen i området. Hvis der ikke er foretaget en kvantificering af observationsusikkerheden, vil dette kriterium kunne anvendes til at vurdere, hvor godt observationsdata i gennemsnit simuleres.
5	$\frac{RMST}{\Delta h_t} \leq \beta_4$	Vurdering af tidlig fejl. Dette dynamiske kriterium benyttes til vurdering af, hvor godt de ikke-stationære variationer simuleres. Δh_t er amplituden på de sæsonmæssige variationer i observeret trykniveau.

Afhængigt af om usikkerheden på observationsdata er bestemt, kan både kriterium nr. 1 samt et eller flere af kriterierne 2 – 5 i tabel 10.2 specificeres. Hvor stringente krav, der skal opstilles til en given model, afhænger af formålet med undersøgelsen. I tabel 10.3 er der givet et eksempel på, hvordan nøjagtighedskriterierne bliver skærpet i takt med at kravene til modellens pålidelighed øges.

Tabel 10.3 Eksempel på nøjagtighedskriterier for forskellige modeltyper (jvf. afsnit 2.4). Procentsatsen i parentes angivet for kriterium 2 svarer til konfidensintervallet for det pågældende nøjagtighedskriterium.

	Overslagsberegning	Akvifer simulering	
		Konservativ	High fidelity
β_1	0.15	0.1	0.05
β_2	2.6 (99%)	2 (95%)	1.65 (90%)
β_3	0.2	0.1	0.05

Hvis det antages, at observationsfejlen er normalfordelt, vil eksempelvis kriteriet $\beta_2 = 2$ betyde, at simuleringsværdierne i gennemsnit skal falde indenfor observationsværdiernes 95%-konfidensinterval.

10.4 KALIBRERINGSPARAMETRE

10.4.1 A-priori viden om parametre

Alle typer af parametre, som indgår i en grundvandsmodel, kan principielt set inkluderes i kalibreringsprocessen. Det er imidlertid primært de hydrauliske parametre, oftest den hydrauliske ledningsevne, som tilpasses, men også lækagekoefficienter, magasinkoefficienter m.m. kalibreres. Andre parametertyper som randbetingelser (flux gennem rand, nedsivning) og empiriske parametre

(bl.a. tidskonstanter) kan estimeres. Der er dermed meget brede grænser for antallet af kalibrerede parametre, ligesom der kan indgå mange typer af parametre i estimationen.

Det forudsættes her, at der under opstillingen af den hydrogeologiske tolkningsmodel er foretaget en parametrisering, hvor antallet af frie parametre er reduceret betydeligt i forhold til antallet af numeriske celler. F.eks. vil reservoiret normalt blive inddelt i en række geologiske enheder (f.eks. moræneler, smeltevandssand, osv.), indenfor hvilke de hydrauliske egenskabers rumlige struktur antages kendt (f.eks. homogen fordeling, lineær funktion af stedet eller geostatistisk model). Parametriseringen er nødvendig for at kunne bestemme parameterverdierne, men samtidig medfører denne integrerede beskrivelse af store områder, at der ofte vil være uoverensstemmelse mellem parameteren målt i det fysiske system og den "effektive" modelparameter, som er optimal i modellen. Samtidig kan der være stor forskel på parameterverdier målt eksempelvis på borekerner, ved slugtest, ved korttids- og langtidsprøvepumpning. De fire målinger repræsenterer en skala af størrelsesorden 0.1 m til 1000 m, og kan pga. den geologiske heterogenitet afvige markant fra hinanden (se f.eks. Schulze-Makuch & Cherkauer, 1998).

Man kan derfor sætte spørgsmålstegn ved, om inddragelse af f.eks. målt hydraulisk ledningsevne er fordelagtig ved bestemmelsen af modelparametrene. Skalaeffekterne nødvendiggør, at der i givet fald skal benyttes information fra en skala, der svarer til den skala, der modelleres på (cellestørrelsen). Parametre målt på anden skala skal anvendes med varsomhed, og hvis de anvendes, tillægges en stor usikkerhed. Passende udvalgte feltmålinger kan anvendes til primært tre formål: En vurdering af, hvordan potentielle kalibreringsparametre defineres; en fastsættelse af realistiske grænser for de optimerede parametre; og som initielle parameterverdier i estimationsprocessen.

Parametriseringen udført under opstillingen af den hydrogeologiske tolkningsmodel vil kunne anvendes til at identificere kalibreringsparametre. Den rumlige fordeling af definerede geologiske/hydrogeologiske enheder kan umiddelbart anvendes til definition af kalibreringsparametre. Imidlertid kan det anbefales, at kalibreringsprocessen påbegyndes med en så simpel model som muligt (Hill, 1998). Hvis der derfor foreligger data, eksempelvis prøvepumpningsresultater, der indikerer, at to eller flere geologiske enheder har relativt ens hydraulisk ledningsevne, vil det være hensigtsmæssigt i første omgang at tillægge disse enheder ét sæt hydrauliske parametre. Senere i kalibreringsprocessens forløb kan modellen forfines, hvis det er påkrævet for at opnå en tilstrækkelig god overensstemmelse mellem data og model.

Den tilgængelige information om reservoirets hydrauliske egenskaber kan benyttes til at indsnævre grænserne for modelparametrene. Selv om de kalibrerede parametre ikke forventes at svare fuldstændig til de fysiske værdier, vil feltmålinger normalt kunne anvendes til at definere et interval, som det vurderes rimeligt at modelparameteren holder sig indenfor. Desuden vil feltdata give en ide om den indbygtes størrelsesfordeling mellem geologiske enheders parameterverdier. F.eks. vil den hydrauliske ledningsevne for moræneler forventes at være lavere end for smeltevandssand.

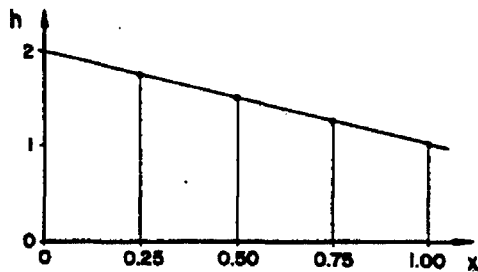
Parametermålinger vil også kunne fungere som initielle estimater i estimationsprocessen. For at opnå et tilfredsstillende kalibreringsresultat med en minimeret arbejdsindsats, er det vigtigt at have præcise initielle parameterestimater. Passende brug af parametermålinger vil her være en vigtig informationskilde.

10.4.2 Valg af kalibreringsparametre

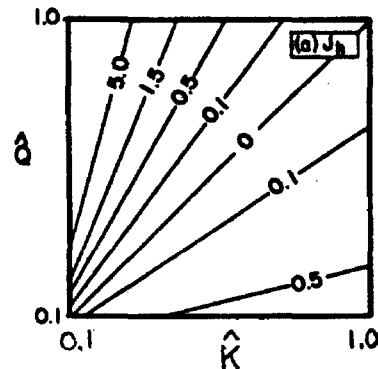
Følgende forhold skal tages i betragtning, når kalibreringsparametrene udvælges: (1) De skal være identificerbare, (2) de skal være relativt dårligt kendt, (3) de simulerede tilstandsvariable skal være tilstrækkeligt sensitive overfor ændringer i parameteren, (4) antallet af parametre skal minimeres.

Identificerbarhed vedrører den direkte simulering af tilstandsvariable. At en parameter ikke er identificerbar indebærer, at der ikke findes en entydig løsning til det opstillede problem mht. parametrene. Ikke identificerbarhed optræder med andre ord, hvis forskellige parametersæt kan føre til samme løsning mht. tilstandsvariablene.

Et meget simpelt tilfælde på ikke identificerbarhed optræder i forbindelse med en stationær løsning. Magasinkoefficienten vil her være ikke identificerbar, da parameteren ikke indgår i det opstillede ligningssystem. De mere komplekse tilfælde af ikke identificerbarhed optræder, hvor forskellige parameterkombinationer kan resultere i samme trykfordeling. I figur 10.2 ses et eksempel på denne type ikke-identificerbarhed. I en endimensional situation med stationær strømning i et homogent medium med fastholdt tryk ved $x = 0$ og konstant flux Q ved $x = 1$ er den hydrauliske ledningsevne K og fluxen Q ikke identificerbare samtidigt, da trykniveauet kun er følsomt overfor forholdet mellem K og Q . Konturlinierne for objektiv funktionen (en norm af typen (10.5)) ses på figur 10.2b. Uendeligt mange kombinationer af K og Q kan resultere i samme trykniveaufordeling og dermed minimumsværdi af objektiv funktionen, og parametrene er derfor ikke identificerbare simultant.



Figur 10.2a Plot af trykniveau mod x i et endimensionalt eksempel (fra Carrera & Neuman, 1986).



Figur 10.2b Konturlinier af objektiv funktionen (svarende til en norm af typen (10.5)). Fra Carrera & Neuman (1986).

Det samme kan være tilfældet med hydraulisk ledningsevne og grundvandsdannelse (perkolation) for et homogent reservoir uden interne randbetingelser. En forøgelse af grundvandsdannelsen vil i dette tilfælde have samme effekt på det hydrauliske trykniveau som en reduktion af den hydrauliske ledningsevne har. De to parametre er derfor ikke identificerbare samtidigt, og det vil i et sådant tilfælde kun være muligt at estimere en af parametrene ud fra trykniveauobservationer. I en given situation vil en analytisk betragtning af det foreliggende problem ofte kunne resultere i en identifikation af sandsynlige problemer med manglende identificerbarhed (se f.eks. Carrera & Neuman, 1986, for en detaljeret gennemgang af emnet).

Kalibreringsparametrene vælges bedst blandt de modelparametre, der dels har størst indflydelse på strømningssimuleringerne og dels er dårligst kendt. Nogle modelparametre og -variable vil være relativt velkendte. F.eks. vil nedbøren (under danske forhold) ofte være kendt ud fra målinger, ligesom visse randbetingelser (f.eks. trykniveauet i veldefinerede vandområder) kan være velkendte. Det vil derfor være mere effektivt at inddrage andre parametre i estimationsprocessen. Informationsniveauet kan for andre parametres vedkommende være meget sparsomt, men af fysiske årsager kan parameteren være bundet til et snævert interval. F.eks. vil porøsiteten ofte kunne skønnes indenfor en margen på en faktor to alene ud fra en geologisk kvalitativ beskrivelse af bjergarten. I modsætning kan en parameter som den hydrauliske ledningsevne variere indenfor flere dekader, og det er derfor vigtigere at få fastlagt værdien af en sådan parameter. Den hydrauliske ledningsevne har desuden afgørende indflydelse på både beregningen af trykniveau, strømningsveje og forureningsudbredelse og er derfor den parameter, som hyppigst anvendes som kalibreringsparameter.

Til den endelige udvælgelse af kalibreringsparametre er en simple sensitivitetsanalyse et stærkt redskab. Ved denne metode eksekveres modellen en eller to gange for hver parameter. Hver gang modellen køres, ændres værdien af en parameter lidt (5 – 25 %) fra dens initiale værdi, og den resulterende påvirkning af de simulerede tilstandsvariable registreres (ofte udtrykt ved RMS-

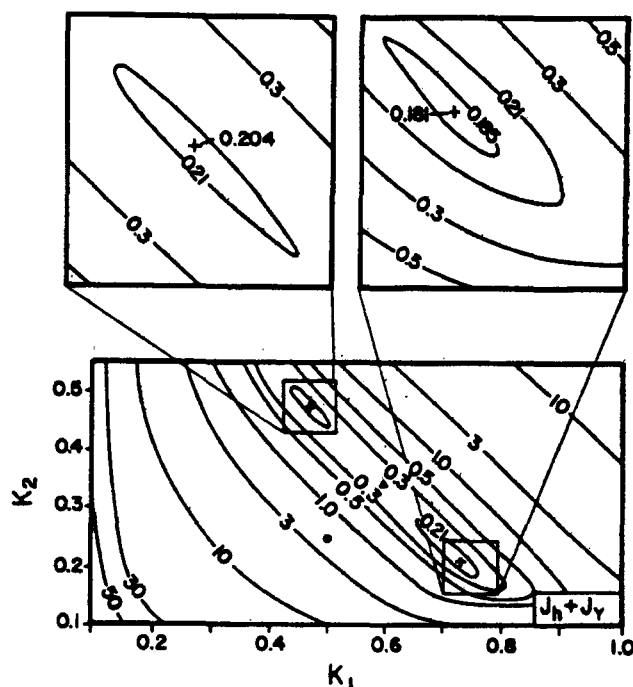
værdien). På baggrund af sensitivitetsanalysen vil det være muligt at identificere de modelparametre, som har størst indflydelse på afvigelsen mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel. Kalibreringsparametrene kan dermed udvælges på et objektive kriterium, og er ikke alene afhængigt af modellørens erfaring og subjektive vurderinger.

10.5 ESTIMATIONSTEKNIK

Estimationen af kalibreringsparametrene kan foretages enten ved manuel kalibrering eller automatisk kalibrering (invers modellering). Manuel kalibrering baserer sig på modellørens evne til successivt at ændre parameterværdierne, så modellen giver en forbedret beskrivelse af observationsdata. Den automatiske kalibrering bygger på en matematisk beskrivelse af estimationsprocessen, hvorved optimale parameterværdier kan estimeres uden modellørens intervention.

10.5.1 Entydighed

Begge teknikker kan have problemer med at estimere optimale parametre, hvilket i mange tilfælde skyldes problemer med entydighed. Entydighed angår den inverse relation, dvs. hvis forskellige parametersæt kan fremkomme fra samme observationsdatasæt, siges problemet at være ikke entydigt. Flere lokale minima i funktionen, der skal minimeres (f.eks. RMS-værdien, lign. 10.5), kan være årsag til ikke entydighed, se figur 10.3, ligesom manglende identificerbarhed (se afsnit 10.4.2) kan være det. Hvis antallet af parametre overstiger antallet af observationer, vil problemet ligeledes være ikke-entydigt.



Figur 10.3 Konturlinier for objektiv funktionen (en norm af typen (10.5)) for et én-dimensionalt strømningsproblem med to hydrauliske ledningsevner, K_1 og K_2 (fra Carrera & Neuman, 1986).

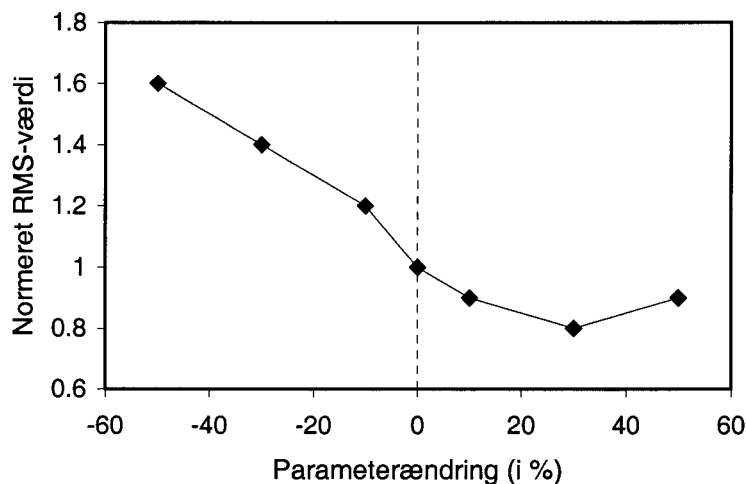
Indenfor grundvandsmodellering er det imidlertid ikke muligt ad analytisk vej at bestemme, om et problem er entydigt. Derfor analyseres det, om problemet er identificerbart, og hvis det er tilfældet, er der god chance for, at problemet også er entydigt. Identificerbarhed er imidlertid ikke en tilstrækkelig betingelse for entydighed. Problemet med manglende entydighed er altså ikke relateret til, hvilken estimationsteknik der anvendes, men udelukkende et spørgsmål om, hvordan problemet

er formuleret. Generelt sikres entydighed bedst, hvis flere af følgende faktorer er opfyldt: (1) Flere forskellige observationstyper inddrages i kalibreringen, (2) Observationsdata er jævnt fordelt i sted og tid, (3) Usikkerheden på observationsdata er minimal, (4) Antallet af kalibreringsparametre er lavt, (5) Den valgte kombination af kalibreringsparametre er identificerbare, (6) Modellen udviser relativ stor sensitivitet (og relativt ens sensitivitet) overfor de udvalgte kalibreringsparametre, (7) Modellen kalibreres mod flere forskellige hydrologiske påvirkninger (f.eks. våd og tør periode).

10.5.2 Manuel kalibrering ('trial-and-error' estimation)

Manuel kalibrering kaldes også for "trial-and-error" estimation, hvilket indikerer, at retningen og størrelsen af ændringen på parametrenes værdi er baseret på ren tilfældighed. Dette er langt fra tilfældet, idet den manuelle kalibrering kan gøres mere eller mindre systematisk, alt efter hvilke informationer, der ligger til grund for ændringen af kalibreringsparametrene. Den første informationskilde, som er umiddelbart tilgængelig, når modellen er eksekveret, og simuleringresultaterne er sammenlignet med observationsværdier, er den rumlige og tidslige fordeling af residualerne. Ud fra denne fordeling vil en modellør med god indsigt i det modellerede system og en god portion erfaring kunne vurdere, i hvilken retning kalibreringsparametrene skal flyttes for at opnå en bedre overensstemmelse mellem model og data. Metoden er konceptuelt enkel, men hvis der arbejdes med en kompleks grundvandsmodel, kan det være endog meget svært at gennemskue dynamikken i systemet. I sådanne tilfælde er der relativt store chancer for, at optimeringen for en uerfaren modellør reduceres til rent "trial-and-error", hvilket kan resultere i mange ikke succesfulde opdateringer af kalibreringsparametrene og ringe chancer for at opnå en velkalibreret model.

Estimationsprocessen kan gøres betydeligt mere gennemskuelig, hvis der gennemføres en detaljeret sensitivitetsanalyse, hvor modellen eksekveres 4 til 10 gange for hver kalibreringsparameter. I hver enkelt kørsel ændres én parameters værdi med en specificeret faktor (f.eks. 0.5, 0.7, 0.9, 1.1, 1.3, 1.5), og f.eks. RMS-værdien beregnes for hver parameter værdi. Efterfølgende er det muligt at plote de beregnede RMS-værdier mod de testede parameter værdier og herved opnå et kriterium for, i hvilken retning og hvor meget parameter værdien skal ændres, for at opnå en bedre simulering af observationerne. I eksemplet illustreret i figur 10.4 ses, at der opnås en bedre beskrivelse af observationsdata, hvis den aktuelle kalibreringsparameter forøges med ca. 30%.



Figur 10.4 Resultat af detaljeret sensitivitetsanalyse udført på en parameter vha. 6 modelsimuleringer. RMS normeret med RMS-værdien opnået for det foregående iterationstrin er anvendt som kriterium for parameterændringen.

Ulempen ved den detaljerede sensitivitetsanalyse er, at der skal foretages mange modelsimuleringer for at kunne opdatere parametrene. Hver gang en parameter skal ændres, kræves der 4 – 10 modelkørsler. Med eksempelvis 10 parametre og 10 kalibreringsiterationer skal der foretages et sted mellem 400 og 1000 modelsimuleringer. Selv om den detaljerede sensitivitetsanalyse kan automatiseres mere eller mindre (f.eks. i *Groundwater Vistas*, ESI, 1999), vil denne procedure ikke være attraktiv, hvis der eksempelvis arbejdes med en ikke-stationær model, som det tager af størrelsesorden 10 timer at eksekvere.

I tilfælde hvor eksekveringen af det ikke-stationære problem kræver lang beregningstid, kan det anbefales, at der først opstilles en stationær model for det aktuelle system. Det kræver naturligvis, at problemet kan formuleres stationært, hvilket ikke altid er muligt eller hensigtsmæssigt (f.eks. prøvepumpningsforsøg). En stationær model vil typisk have eksekveringstid af størrelsesorden 1 – 10 minutter, og der vil derfor kunne gennemføres mange modelsimuleringer på relativt kort tid. I første trin kalibreres den stationære model, eventuelt ved anvendelse af detaljeret sensitivitetsanalyse. I næste trin kalibreres den ikke-stationære model, idet kun parametre relateret til systemets magasineringseffekter (f.eks. specifik ydelse) justeres. Ved anvendelse af denne procedure vil det ofte være muligt at opnå et godt kalibreringsresultat indenfor et relativt begrænset tidsrum.

Uanset om estimationen baseres på en direkte analyse af residualerne eller en detaljeret sensitivitetsanalyse, vil kalibreringen af parametrene forløbe som en iterativ proces, hvor kalibreringsparametrene ændres, modelresultater sammenlignes med observationsdata, og det vurderes, om der er opnået en bedre model end på foregående iterationstrin. Til sidst vil der ikke kunne opnås en yderligere reduktion i de inkluderede normer, og hvis den formulerede model (geologisk model, hydrogeologisk tolkningsmodel, diskretisering, definition og antal af kalibreringsparametre, m.m.) er for simpel (eller fejlbehæftet), vil kalibreringskriterierne ikke være opfyldt. Det vil i sådanne tilfælde være nødvendigt at gå tilbage til trin 3 i kalibreringsprotokollen, og revurdere den formulerede model og valget af kalibreringsparametre. I det enkle tilfælde er det tilstrækkeligt at inddrage flere parametre i estimationen, f.eks. ved at gennemføre en yderligere distribuering af de hydrauliske egenskaber. I de mere komplekse tilfælde vil det være nødvendigt at reformulere den hydrogeologiske tolkningsmodel, den geologiske model eller procesbeskrivelsen. Resultatet af denne analyse vil være en ny kalibreringsmodel, som kan underkastes estimationsprocessen.

10.5.3 Automatisk kalibrering (invers modellering)

I invers modellering sker estimationsprocessen 4.1 – 4.4 på figur 10.1 på baggrund af matematisk formulerede kriterier og foregår mere eller mindre automatisk. De inverse løsningsmetoder opdeles i direkte og indirekte teknikker. I den direkte metode forudsættes observeret hydraulisk trykniveau at være kendt i samtlige knudepunkter i det numeriske net, hvorved de styrende ligninger kan løses direkte mht. modelparametrene. I praksis er det imidlertid nødvendigt at interpolere ud fra relativt få observationer. De interpolerede data vil være fejlbehæftede, og sammen med måle- og modelfejl er det problematisk for teknikken, da det ofte resulterer i ustabile løsninger, og metoden er derfor meget lidt anvendt. De indirekte metoder er baseret på at minimere afvigelsen mellem observeret og beregnet afhængig variabel, f.eks. trykniveau, og minder i princip meget om manuel kalibrering. Da parametrene er ikke-lineære funktioner af tilstandsvariablene foregår optimeringen iterativt. De indirekte inverse metoders formål at finde de modelparametre, som fører til en optimalt overensstemmelse mellem observeret og beregnet afhængig variabel. Dette fører til definitionen af objektiv funktionen (f.eks. summen af afvigelses kvadrater, lign. (10.3)), således at minimering af objektiv funktionen fører til minimering af eksempelvis trykafvigelse. Minimum i objektiv funktionen findes typisk vha. gradientbaserede metoder (f.eks. Levenberg-Marquardts metode).

De inverse teknikker vil ikke blive gennemgået i detaljer her, men yderligere information kan findes i f.eks. reviewartiklen af Yeh (1986). Danske anvendelser af inverse metoder kan findes i f.eks. Keidser & Rosbjerg (1991), Sonnenborg et al. (1996) og Christensen et al. (1998). I Appendix B kan anvendelsen af invers modellering i forbindelse med DK-modellen desuden findes.

Begrundelsen for at indføre invers modellering er, at parametrene bestemmes ud fra objektive kriterier for afvigelsen mellem observeret og simuleret afhængig variabel. På grund af den systematiske

måde hvorpå parametrene justeres (baseret på gradienter) vil der være større chance for at finde optimale parameterestimater end ved manuel kalibrering. Invers modellering kan være arbejdsbesparende, og metoden giver mulighed for at opnå en kvantificering af f.eks. parameterkorrelation og parameterusikkerhed.

Inverse metoder indenfor grundvandsmodellering har været kendt i næsten lige så lang tid, som de numeriske modeller har været anvendt, men benyttes ikke tilnærmelsesvis i samme udstrækning. Dette skyldes til dels, at invers kalibrering kræver mange modelsimuleringer og derfor kan resultere i lang beregningstid. I takt med udviklingen af hurtigere computere er denne begrundelse imidlertid blevet mindre tungtvejende. Til gengæld er de inverse metoder beskyldt for at give urealistiske parameterestimater, at være ustabile eller ikke at konvergere. Disse problemer skyldes ofte en u hensigtsmæssig formulering af estimationsproblemet, bl.a. problemer med identificerbarhed og entydighed beskrevet ovenfor. Der er derfor grund til at være ekstra omhyggelig med fase 1-3 i kalibreringsprocessen, når der anvendes en invers model.

Forskellen på manuel og automatisk kalibrering ligger hovedsageligt i kalibreringsprotokollens fase 4.1 – 4.4. De øvrige trin i kalibreringsprocessen er stort set identiske for de to metoder, og det vil i tilfælde af velformulerede kalibreringsproblemer være sandsynligt, at metoderne giver relativt ens parameterestimater. Det kan anbefales at kombinere metoderne, så der indledes med grovkalibrering ved anvendelse af manuel kalibrering, og afsluttes med invers kalibrering til finkalibrering.

10.6 PRÆSENTATION AF KALIBRERINGSRESULTAT

10.6.1 *Beskrivelse af kalibreringsprocessen (kalibreringsjournal)*

Modtageren af modelresultaterne vil sjældent være interesseret i en beskrivelse af udviklingen af de enkelte parametres værdi gennem den iterative optimering af modellen, hvor der typisk foretages mellem 50 og flere hundrede simuleringer. Det vil imidlertid være interessant at blive præsenteret for eventuelle ændringer i den opstillede model for kalibreringsprocessen, dvs. i de tilfælde hvor estimationsprocessen 4.1 – 4.4 i figur 10.1 ikke konvergerer indenfor de opstillede kalibreringskriterier, og det er nødvendigt at gå tilbage til trin 3 og modificere kalibreringsparametre eller den underliggende model. Da det kan være nødvendigt at revurdere modelopbygningen adskillige gange i kalibreringsforløbet, vil det være hensigtsmæssigt at præsentere (eventuelt i tabelform) de bedste værdier af de benyttede normer (10.1) – (10.5) for hver model. Herved kan modtageren få et indblik i, hvilke ændringer der har været afprøvet, og hvad der har bidraget til at opnå en velkalibreret grundvandsmodel.

10.6.2 *Parameterestimater samt deres usikkerhed*

De optimerede parameterværdier skal præsenteres, typisk i tabelform, men også en grafisk illustration af parameterværdierne kan anvendes. Samtidig skal der foretages en evaluering af de estimerede parametres fysiske relevans. I en grafisk illustration kan parameterintervallerne estimeret under analysen af tilgængelige feltmålinger (afsnit 10.4.1) sammenholdes med de optimerede parametre, hvilket gør det muligt at foretage en hurtig vurdering af, om de estimerede parametre holder sig indenfor eller i nærheden af fysisk realistiske grænser. I modsat fald skal det kommenteres, hvad årsagen til det usædvanlige estimat kan være.

Hvis der er ønske om at få undersøgt usikkerheden på de estimerede parametre, skal der genereres resultater, der kan belyse dette emne. Hvis der er udført manuel kalibrering kan usikkerheden vurderes vha. en detaljeret sensitivitetsanalyse, som er beskrevet under afsnit 10.5.2. Herved opnås et udtryk for modellens følsomhed overfor de analyserede parametre, og usikkerheden på parameterværdien kan derefter vurderes, idet den generelt kan antages at være omvendt proportional med modellens sensitivitet. Det er ikke muligt at kvantificere parameterusikkerheden direkte (f.eks. en standardafvigelse) vha. denne metode, men det kan vurderes, hvordan parametrene indbyrdes er rangeret mht. modelsensitivitet. Dvs. den mest sensitive parameter vil give det største påvirkning af

f.eks. RMS-værdien i den detaljerede sensitivitsanalyse, og vil være den parameter, der er forbundet med den mindste usikkerhed.

Hvis der er anvendt en invers model baseret på en gradientløsning, som f.eks. PEST (Doherty et al., 1994) eller UCODE (Poeter and Hill, 1998), vil det være muligt at uddrage informationer om parameterusikkerheden i form af konfidens- eller prediktionsintervaller.

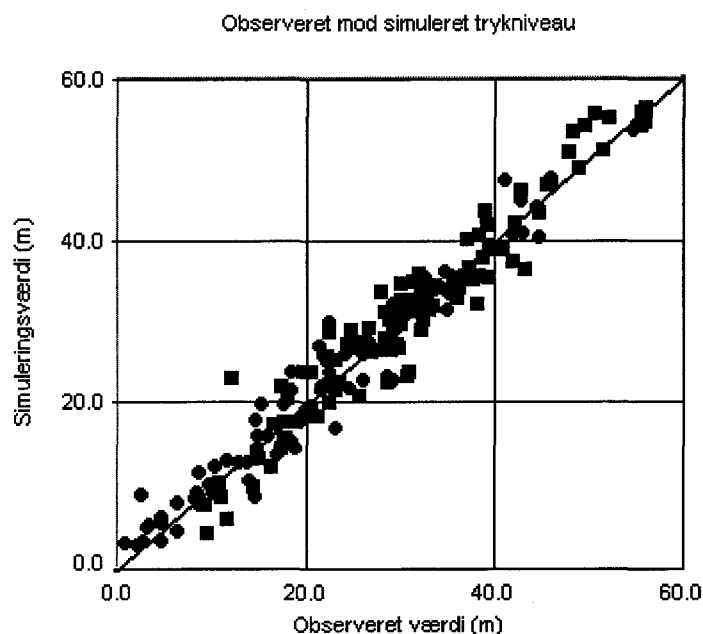
10.6.3 Overensstemmelse mellem observationer og simulering

Kalibreringsresultatet skal altid afrapporteres i henhold til de kriterier, der er opstillet til arbejdet. Hvis der eksempelvis er stillet krav til maksimumværdier af ME og RMS, vil det være passende at præsentere de opnåede værdier eventuelt i tabelform, hvor det kan vises, hvor godt modellen simulerer de målte værdier i modelområdet. I tabel 10.4 er vist et eksempel fra Esbjergmodellen (appendiks A), hvor overensstemmelsen med (a) hele modellen under ét, (b) målinger af forskellig karakter og (c) målinger i modellens beregningslag præsenteres.

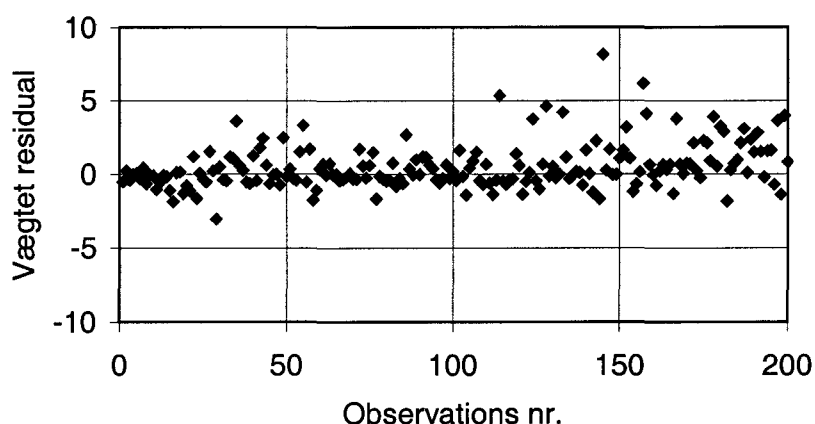
Tabel 10.4 Eksempel på rapportering af kalibreringsresultat i tabelform (Henriksen et al., 1995).

	Synkronmåling marts 1995	Synkronmåling august 1995	ZEUS datagrundlag
HELE MODELLEN			
Antal målepunkter	65	48	471
Middel afvigelse, ME (m)	-0.70	0.36	0.40
Standard afvigelse, St.dev. (m)	1.82	1.63	2.96
RMS-værdi (m)	1.94	1.66	2.98
Lag 1- antal målepunkter	0	0	50
RMS-værdi (m)	-	-	2.83
Lag 2- antal målepunkter	13	4	136
RMS-værdi (m)	2.35	2.27	3.04
Lag 3- antal målepunkter	13	9	142
RMS-værdi (m)	2.09	1.81	3.08
Lag 4- antal målepunkter	8	6	100
RMS-værdi (m)	1.42	1.25	2.84
Lag 5- antal målepunkter	10	8	23
RMS-værdi (m)	1.38	1.44	3.14
Lag 6- antal målepunkter	4	4	12
RMS-værdi (m)	1.92	1.44	1.86
Lag 7- antal målepunkter	5	5	7
RMS-værdi (m)	1.75	1.81	3.76
Lag 8- antal målepunkter	7	7	0
RMS-værdi (m)	1.80	1.37	-
Lag 9- antal målepunter	4	4	0
RMS-værdi (m)	2.52	2.05	-
Lag 10- antal målepunkter	1	1	1
RMS-værdi (m)	1.51	0.63	3.39

Fordelingen af overensstemmelsen mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel kan også præsenteres i en tabel, hvor placering af boring, tidspunkt for måling, observationsværdi, simuleret værdi og residual opføres. Det kan imidlertid hurtigt blive svært at overskue fordelingen af residu-

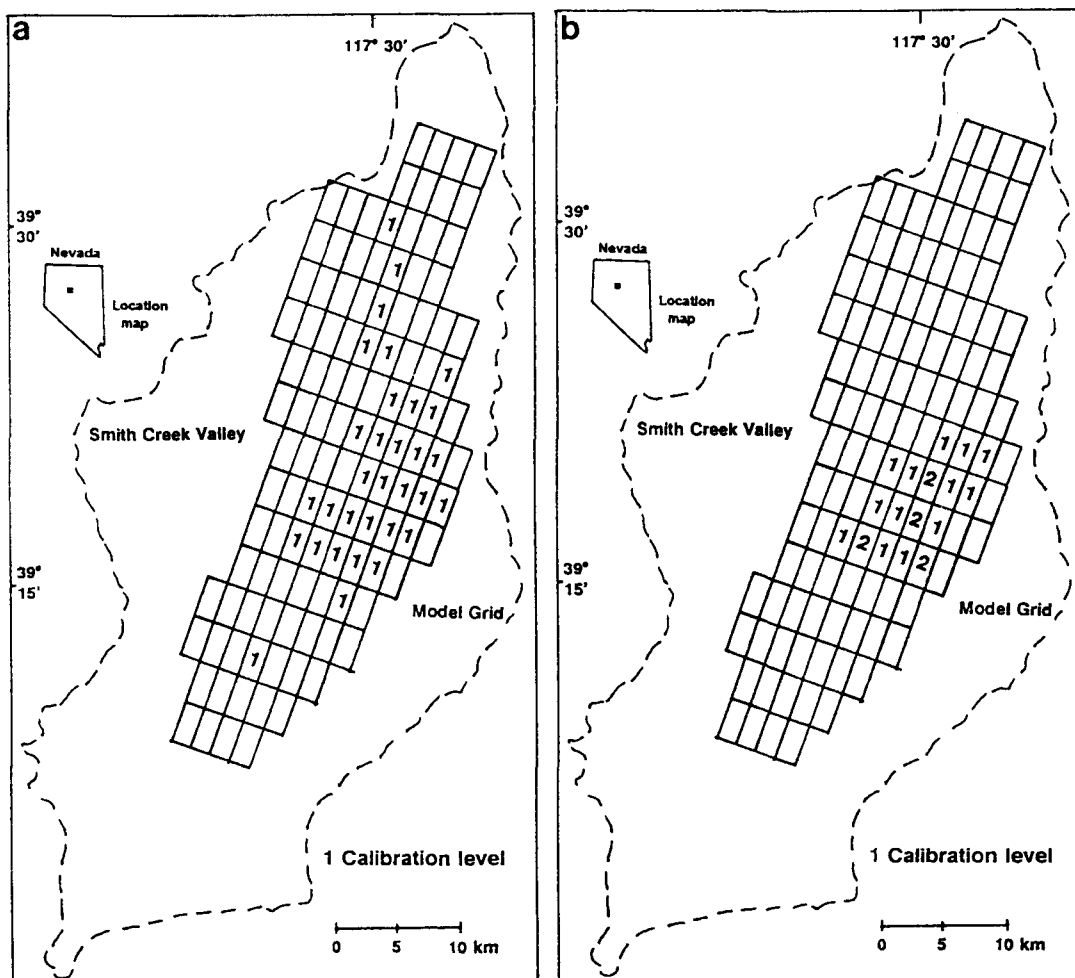


Figur 10.6 Scatterplot af simuleret mod observeret trykniveau (Esbjergmodellen, Appendiks A).



Figur 10.7 Residualplot af vægtede residualer (trykniveaudata) mod observationsnummer.

Det kan være en hjælp i evalueringen af den rumlige fordeling af modelleringsresultatet, at sammenholde residualerne med et af de anvendte nøjagtighedskriterier. Herved kan niveauet, hvormed den enkelte observation er simuleret, kvantificeres. Eksempelvis kan standardafvigelsen på observationsdata anvendes til opstilling af en række niveauer. Det kan vælges af karakterisere niveau 1 ved, at modellen rammer inden for observationsværdien \pm en standardafvigelse, niveau 2 ved observationsværdien \pm to standardafvigelser, osv. Den rumlige fordeling af niveauet, hvormed modellen simulerer data, kan herefter illustreres i en figur, der viser det numeriske net, hvor celler med observationsværdier tillægges en niveauværdi, se figur 10.8.



Figur 10.8 Fejlniveauer for hhv. hydraulisk trykniveau (til venstre) og gradienten på hydraulisk trykniveau (til højre) for et grundvandsmagasin (fra Anderson & Woessner, 1992).

10.7 REFERENCER

Anderson, M.P., Woessner, W.W. (1992) Applied groundwater modeling. Simulation of flow and advective transport. Academic Press, San Diego, California, USA.

Bjarnov, S. (1987) Beregning af medianminimum på grundlag af årsminimumsserier. Hedeselskabets Forskningsvirksomhed. Beretning nr. 32.

Blicher, A.S. (1991) Usikkerhed på bearbejdning af data fra vandføringsstationer. Publikation nr. 1 (rev. udgave) fra Fagdatacenter for Hydrometriske Data, Hedeselskabet.

Carrera, J., Neuman, S.P. (1986) Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Condition: 2. Uniqueness, Stability, and Solution Algorithms. Water Resources Res., 22(2), 211-227.

- Christensen, S. (1997) On the strategy of estimating regional-scale transmissivity fields, *Ground Water*, 35(1), 131-139.
- Christensen, S., Rasmussens, K.R., Møller, K. (1998) Prediction of regional ground water flow to streams, *Ground Water*, 36(2), 351-360.
- Doherty, J., Brebber, L., Whyte, P. (1994) PEST. Modelindependent Parameter Estimation. Watermark Computing.
- ESI (1999) Guide to using Grounwater Vistas. Version 2.4. Herndon, Virginia.
- Gelhar, L.W. (1986) Stochastic subsurface hydrology. From theory to applications, *Water Resour. Res.*, 22(9), 135S-145S.
- Harrar, W., Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted Å aquifer system: Setup and calibration. Unpublished report. GEUS.
- Henriksen, H.J., Harrar, W.G., Morthorst, J., Nyegaard, P., Dahl, M. (1995) Nye vandindvindingsmuligheder for Esbjerg kommune. Fase IV – model. GEUS Kunderapport nr. 51.
- Henriksen, H.J., Knudby, C.J., Rasmussen, P., Nyegaard, P. (1997) National vandressource model. Modelopstilling og kalibrering for Fyn. GEUS undersøgelses rapport 1997/139.
- Hill, M.C. (1998) Methods and guidelines for effective model calibration. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005, Denver, Colorado, USA.
- Jensen, J.L. (1993) Rererenceperiode for karakteristiske afstrømningsværdier. Publikation nr. 13 fra Fagdatacenter for Hydrometriske Data, Hedeselskabet.
- Keidser, A., Rosbjerg, D. (1991) A comparison of four inverse approaches to groundwater flow and transport parameter identification. *Water Resources Res.*, 27(9), 2219-2232.
- Poeter, E.P., Hill, M.C. (1998) Documentation of UCODE:: A computer code for universal inverse modeling, U.S. Geological survey, Water Resources Investigations Report 98-4080, Denver, Colorado, USA.
- Refsgaard, J.C. (1997) Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models, *J. Hydrology*, 198, 69-97.
- Schulze-Makuch, D., Cherkauer, D.S. (1998) Variations in hydraulic conductivity with scale of measurement during aquifer tests in heterogeneous, porous carbonate rocks, *Hydrogeology Journal*, 6, 204-215.
- Sonnenborg, T.O., Engesgaard, P., Rosbjerg, D. (1996) Contaminant transport at a waste residue deposit .1. Inverse flow and nonreactive transport modeling, *Water Resour. Res.*, 32(4), 925-938.
- Yeh, W.W-G. (1986) Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem. *Water Resources Res.*, 22(2), 95-108.

Kapitel 11 VALIDERING

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Validering af model, verifikation af kode, valideringstests, split-sample, proxy-basin, differential split-sample, overparameterisering og frihedsgrader, uafhængige datasæt, jackknifing og modelgyldighed.

ABSTRACT: Spørgsmålet om, hvorvidt modeller overhovedet kan valideres har været omdiskuteret det seneste årti, og ud fra et anti-positivistisk synspunkt, kan en teori (her en model) aldrig bevises som værende generel gyldig, men kan derimod afvises hvis et enkelt eksempel begrunder dette. Et vigtigt element i modelvalideringen er fastsættelsen af relevante test. For at vurdere om en kalibreret model kan betragtes som gyldig til efterfølgende brug skal den valideres ved test mod andre data end dem, der blev brugt til kalibrering. Model validering indebærer således at dokumentere, at en sted-specifik model kan producere beregningsresultater, som kan opfylde de givne nøjagtighedskrav. En model må kun karakteriseres som valideret på de områder, hvor der er gennemført valideringstest.

11.1 INDLEDNING

Begreberne validering og verifikation bliver brugt i flæng (men i forskellig betydning) hos forskellige forfattere, f.eks. Konikow (1978), Schlesinger et al. (1979), Klemes (1986), Tsang (1991), Anderson and Woessner (1992), Flavelle (1992), Larsson (1992), Oreskes et al. (1994), Dee (1995), Refsgaard and Knudsen (1996) og Beven (1996).

Spørgsmålet om, hvorvidt modeller overhovedet kan valideres er med stærke bånd til grundlæggende videnskabsfilosofiske opfattelser blevet diskuteret voldsomt de senere år. Konikow og Bredehoeft (1992) fremførte således som eksponent for den ene opfattelse at begreberne validering og verifikation er vildledende og slet ikke burde bruges:

“ .. the terms validation and verification have little or no place in ground-water science; these terms lead to a false impression of model capability”

Hovedargumentationen herfor er det anti-positivistiske synspunkt, at en teori (her en model) aldrig kan bevises som værende generel gyldig, men derimod kan afkræftes ved et enkelt eksempel. De Marsily et al. (1992) argumenterer i et svar til Konikow og Bredehoeft (1992) for et mere pragmatisk synspunkt:

“ .. using the model in a predictive mode and comparing it with new data is not a futile exercise; it makes a lot of sense to us. It does not prove that the model will be correct for all circumstances, it only increases our confidence in its value. We do not want certainty; we will be satisfied with engineering confidence.”

Et andet eksempel på en forsker, som er kritisk overfor begrebet modelvalidering er Beven (1996), der bl.a. som en reaktion på at mange modeludviklere og -brugere i tidens løb har benyttet ‘validering’ næsten som et gummistempel, påstod at modelvalidering ikke er muligt:

“ .. is there any example of a successfully validated distributed model at the catchment scale ?”

Et hovedproblem i denne diskussion er, at begrebet model ofte benyttes i to vidt forskellige betydninger, nemlig modelkode og en model opstillet for et givet område. Konikow and Bredehoeft (1992), Beven (1996) og andre modstandere mod at bruge ordet modelvalidering referer til begre-

bet modelkode, mens Schlesinger et al. (1979), Anderson and Woessner (1992) og andre forfattere, som benytter begrebet modelvalidering, refererer til model i den mindre generelle betydning en sted-specifik model.

Det vil formentlig aldrig være muligt, og måske heller ikke ønskværdigt, at opnå enighed i forskerkredse om dette grundlæggende videnskabsteoretiske spørgsmål. Dette giver selvfølgelig nogle grundlæggende problemer med hensyn til at nå til enighed i den praktiske verden om en fælles anerkendt terminologi og metodik for modelvalidering. Den praktiske brug af modeller vil øges meget fremover, og mange brugere benytter begrebet modelvalidering uden måske at have en præcis definitionen. Så der vil under alle omstændigheder være brug for at opnå en eller anden form for stramning af terminologi og metodik samt en øget bevidsthed om nødvendigheden heraf.

11.2 DEFINITION OG FORMÅL MED MODELVALIDERING

Som beskrevet i det indledende kapitel (tabel 0.1) benyttes følgende begreber i nærværende ståbi:

- *Verifikation* benyttes om en modelkode, dvs. dokumentation for at en modelkode løser de givne ligninger med en specificeret nøjagtighed.
- *Validering* benyttes i relation til en sted-specifik model, dvs. dokumentation for at en sted-specifik model kan beskrive virkeligheden med en tilfredsstillende nøjagtighed.

En model bør aldrig anvendes uden en forudgående modelvalidering, fordi modellens pålidelighed i så fald ikke kendes. Formålet med modelvalidering er derfor, ved gennemførelse af passende test, at undersøge og dokumentere hvilken nøjagtighed en given model kan forventes at have, når den efterfølgende skal anvendes.

Et vigtigt element i modelvalideringen er fastsættelsen af relevante test. I næste afsnit er der foreslået nogle generelle testtyper, hvor det gennemgående princip er, at et valideringstest skal indeholde situationer sammenlignelige med dem modellen bliver udsat for i den efterfølgende modelanvendelse.

11.3 FORSKELLIGE TYPER AF VALIDERINGSTEST

Grundvandsmodeller indeholder et meget stort antal parametre, hvorfor det næsten altid vil være muligt at finde en kombination af parameterværdier, som giver en god overensstemmelse mellem modeloutput og feltdata i en kort kalibreringsperiode. Det giver imidlertid ingen garanti for, at modelstrukturen eller de skønnede parameterværdier er passende og vil resultere i pålidelige forudsigelser for andre perioder.

For at vurdere hvorvidt en kalibreret model kan betragtes som gyldig til efterfølgende brug skal den valideres ved test mod andre data end dem, der blev brugt til kalibrering. Model validering indebærer således at dokumentere, at en sted-specifik model kan producere beregningsresultater, som kan opfylde de givne nøjagtighedskrav. Det er derfor nødvendigt at specificere sådanne nøjagtighedskrav, før kalibreringen og validerings testene gennemføres. I fastsættelsen af det acceptable niveau for nøjagtighed skal der laves en afvejning mellem hvilke yderligere omkostninger, i form af data indsamling og modelleringsarbejde, og hvilke benefits, i form af større model nøjagtighed, som større nøjagtighedskrav medfører. Nøjagtighedskriterierne vil derfor variere fra sag til sag, og bør ikke fastlægges af modelbrugeren, men af vandressourceforvalteren.

Proceduren foreslået nedenfor er baseret på Klemes (1986). De fire testtyper svarer til forskellige situationer med hensyn til, hvorvidt der findes data til at foretage en kalibrering, og hvorvidt situationen i modelområdet er stationær. Stationaritet hentyder i denne sammenhæng eksempelvis til, hvorvidt der er tale om menneskeskabte ændringer (oppumpning, ændret arealanvendelse, klimaændring, mv.) eller ikke.

- *Split-sample test* er det klassiske test, hvor den tilgængelige data mængde deles i to, hvorefter der kalibreres på den ene og efterfølgende valideres på den anden. Den kan bruges i situationer, hvor der er tilstrækkelige data til en meningsfuld kalibrering, og hvor situationen er stationær.
- *Proxy-basin testet* skal anvendes hvis der ikke findes data til kalibrering i det pågældende område Z, men situationen er stationær. I sådanne tilfælde bør der foretages test i to lignende områder, X og Y, hvor ukalibrerede (blindsimulerede) modelresultater sammenlignes med feltdata. Det er vigtigt, at proceduren for parameterestimationen i de to oplande laves objektiv og gennemskuelig, og at en lignende procedure anvendes i område Z.

Eksempel: I område Z findes data til kalibrering og split-sample test af strømningsmodellen; men der findes ingen koncentrationsdata, så det er ikke muligt at kalibrere og validere stoftransportmodulet på lokale data. Testet består så i at lave blandsimulering af stoftransport (strømningsmodellen kan kalibreres) på to andre oplande X og Y (f.eks. naboområder) med skøn af porøsitet og dispersiviteter taget fra standardtabeller eller på anden objektiv vis relateret til geologien i områderne. Såfremt testene på X og Y kommer inden for nøjagtighedskravene, kan modellen siges at være valideret på område Z.

- *Differential split-sample test*. Dette test skal anvendes i ikke-stationære situationer, hvor der findes lokale data i opland Z til kalibrering, men hvor modellen skal bruges til at forudsige konsekvenser af menneskelige indgreb som f.eks. oppumpninger, ændringer i arealanvendelse eller klimaændringer. Tilsvarende til proxy-basin testet skal der her foretages test på sammenlignelige situationer i to tilsvarende områder, X og Y.

Eksempel: I område Z skal der simuleres konsekvenser af en fremtidig grundvandsoppumpning på vandløb og trykniveauer, og der findes ikke historiske data i området med ændringer i oppumpningen af den pågældende størrelsesorden. Testet består så i at lave blandsimulering på en sammenlignelig situation i to andre oplande, X og Y, med nogenlunde tilsvarende hydrogeologi. Modellerne kan på X og Y kalibreres på situationen før indvindingen, og skal herefter simulere situationen med indvinding. Såfremt testene på X og Y kommer inden for nøjagtighedskravene, kan modellen siges at være valideret på område Z.

- *Proxy-basin, differential split-sample test*. Dette er det vanskeligste test for en hydrologisk model, fordi der ikke findes kalibreringsdata, og modellen skal benyttes til at vurdere en ændret fremtidig situation. Testet er en kombination af de to foregående. I praksis vil det formentlig være vanskeligt for en model at passere dette test positivt uden at benytte meget brede nøjagtighedsrammer, dvs. der vil være meget stor usikkerhed på modelforudsigelserne.

Eksempler på anvendelse af denne testprocedure til modelvalidering findes i Refsgaard and Knudsen (1996). Et andet eksempel på at definere en lignende stringent testprocedure for validering af pesticidmodeller til registreringsformål er beskrevet i Styczen (1995).

11.4 PRAKTISKE ASPEKTER I FORBINDELSE MED MODELVALIDERING

11.4.1 Overparameterisering – antal "frie" parametre

Som beskrevet i afsnit 4.6 er det meget afgørende for en models prediktionsevne at antallet af parameterværdier, som fastsættes "frit" i kalibreringen, er så lavt som muligt. Problemstillingen kan illustreres i figur 11.1

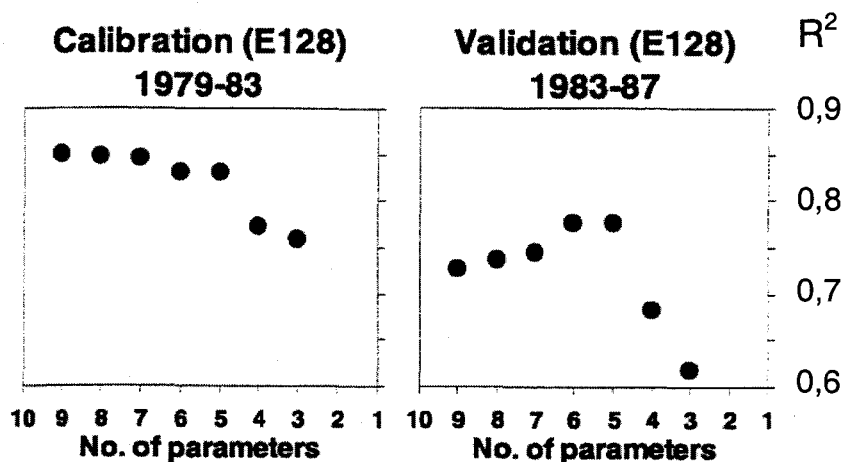


Fig. 11.1 Eksempel på en models nøjagtighed i henholdsvis kalibrerings og valideringsperiode ved valg af forskelligt antal frie parameterværdier, som tilpasses under kalibreringen (Lidén, 2000)

Figur 11.1 er fremkommet som resultat af en split-sample test, hvor der i kalibreringsperioden er foretaget automatisk kalibrering på et forskelligt antal (varierende fra 3 til 9) parametre. Figuren illustrerer tydeligt, at modeltilpasningen (jo højere R^2 værdi jo bedre model) bliver bedre jo flere frie parametre, der indrages i kalibreringen, men den viser samtidigt, at hvis parameterantallet bliver for stort, udarter kalibreringen til ren kurvefitning med ringe prediktionsevne mod uafhængige (validerings)data. Eksemplet i figur 11.1 stammer ikke fra grundvandsmodellering, men den principielle problemstilling er ligeså aktuell i grundvandsmodellering.

Konklusionen på ovenstående er ikke, at modellen ikke må have mange forskellige parameterværdier. Der må godt være et stort antal, hvis blot størstedelen af dem fastlægges på objektiv vis på baggrund af feltdata, som er uafhængige af kalibrerings (og validerings) dataene. Når man så kommer til kalibreringen, er det vigtigt kun at indrage et begrænset antal parametre som "frie". Præcist hvor mange frie parametre, der bør indrages, kan være vanskeligt at sige, fordi det afhænger af informationsindholdet i kalibreringsdataene. Jo bedre datagrundlag i kalibreringen, jo flere parameterværdier kan man tillade sig at kalibrere på.

11.4.2 Valideringstest ved stationær grundvandsmodel

Ved en stationær grundvandsmodel foretages der kalibrering på et enkelt trykniveaubillede, som antages at være repræsentativt for en stationær situation. Derfor kan man ikke her gennemføre en traditionel split-sample test, som beskrevet i afsnit 11.2. Men det er dog stadig af afgørende betydning at gennemføre valideringstest mod uafhængige data. Der er forskellige muligheder herfor, fx.:

- Trykniveauobservationerne, som danner grundlaget for det stationære observerede grundvandsbillede, opdeles i to lige store dele. Herefter foretages der kalibrering mod den ene halvdel af dataene, mens den anden halvdel gemmes som uafhængige data i en efterfølgende valideringstest. Denne proces kan herefter gentages i omvendt rækkefølge. Herved kan opnås en vurdering af modellens evne til at simulere trykniveauer.
- Såfremt der anvendes automatisk kalibrering (invers modellering), kan man på mere systematisk vis undersøge prediktionsevnen, fx ved skiftevis at kalibrere mod alle datapunkter bortset fra et enkelt og herefter validere mod det uafhængige datapunkt. Denne testmetode benævnes jackknifing.

11.4.3 Begrænsninger i valideret models gyldighedsområde

Traditionelt er en model blevet testet med en split-sample valideringstest, hvorefter modellen med henvisning til dens fysisk baserede opbygning ofte er blevet erklæret generelt gyldig, også til simulering af variable og under forhold, hvorpå den slet ikke er testet. En række eksempler fra den internationale litteratur (fx Ambroise et al, 1995; Refsgaard et al., 1997; og Jayetilaka et al., 1998) viser imidlertid, at en model der eksempelvis er kalibreret mod afstrømning på en lokalitet ikke nødvendigvis er lige så god til at simulere afstrømning i et andet (opstrøms) punkt, eller at en model som er valideret mod trykniveaudata fra nogle borerer ikke er nær så nøjagtig til at simulere trykniveauer i andre borerer.

Tilsvarende er udtrykket en models gyldighed ofte blevet anvendt uden kvalificering med hensyn til hvor nøjagtig modellen er til givne formål. Man kan sagtens forestille sig en model, som er nøjagtig nok (og dermed gyldig) til nogle formål, men ikke til andre. Således vil der oftest stilles større nøjagtighedskrav til en model der anvendes til "hi fi" akvifersimuleringer end til modeller, der anvendes til indledende overslagsberegninger (jf. afsnit 2.4).

Det er derfor meget vigtigt at fastslå princippet om, at en model kun må karakteriseres som valideret på de områder, hvor der er gennemført valideringstest, og at der til en models gyldighed altid skal knyttes en nøjagtighed eller en usikkerhed.

Det vil eksempelvis sige, at en model, der kun er valideret mod trykniveaudata, kun har en dokumenteret gyldighed til simulering af trykniveauer, og oven i købet kun for de punkter, hvor der er valideringsdata. En sådan model er ikke dokumenteret at være gyldig også fx til simulering af minimumsvandføringer eller strømningshastigheder i grundvandet. Den kan heller ikke på forhånd antages at være lige så god til at simulere trykniveauer på andre punkter, end hvor den er valideret. Til sidstnævnte formål skal man gennemføre nogle sted-afhængige tests ligesom beskrevet i afsnit 11.4.2 ovenfor.

11.5 ER KRAVENE TIL MODELVALIDERING UREALISTISKE I PRAKSIS?

Ovenstående krav til modelvalidering er angivet ud fra ideelle fordringer til stringens. Hvis man sammenholdt disse fordringer med dagens praksis i grundvandsmodellering ville det formentlig være et fåtal af de eksisterende modeller, som kunne opnå betegnelsen "validerede modeller". Det betyder ikke nødvendigvis at disse modeller er værdiløse, blot at deres pålidelighed ikke er dokumenteret, og at man derfor ikke bør anvende dem som grundlag for større beslutninger. For nogle modellers vedkommende (hvor datagrundlaget eksisterer) kan der forholdsvist nemt gennemføres de relevante valideringstest.

I andre tilfælde eksisterer der ikke de relevante data til at gennemføre de ideelle valideringstest. Det kan fx dreje sig om en model, der påtænkes anvendt til at vurdere konsekvenserne af en oppumpning. Såfremt der slet ikke eksisterer data for situationer med varierende oppumpning i det pågældende opland kan det være nødvendigt at lave test på sammenlignelige nabooplande, som beskrevet i afsnit 11.3 under differential split-sample test. Sådanne test kan aldrig blive så stærke som test på det "rigtige" opland, hvorfor konklusionerne af valideringstestene skal tages med visse forbehold. Såfremt der findes prøvepumpningsdata fra området, kan de styrke valideringsgrundlaget.

Såfremt valideringstestene viser, at modellen ikke opnår den ønskede nøjagtighed, skal man i princippet gå tilbage til Trin 2 i modelprotokollen (etablering af hydrogeologisk tolkningsmodel, jf. figur 0.2) og gentage hele processen, herunder vurdere om der er behov for yderligere feltdata. Alternativt kan man renoncere på ambitionsniveauet og eksplicit acceptere, at modellen har en mindre nøjagtighed end oprindelig ønsket.

Selvom kravene til modelvalidering kan opfattes som ideelle og måske ikke altid nemme at opfylde i praksis, er det af afgørende betydning at være stringent og ærlig i angivelsen af en models valideringsstatus. Ved at gennemgå valideringsfasen tvinges brugeren eksplicit til at overveje og forsøge at dokumentere, hvor god en given model er, og hvor begrænsningerne i dens anvendelse

findes. Stringens omkring modelvalidering er altafgørende for troværdigheden af grundvandsmodeller i praksis.

11.6 REFERENCER

- Ambroise, B., Perrin, J.L. and Reutenauer, D. (1995) Multicriterion validation of a semidistributed conceptual model of the water cycle in the Fecht Catchment (Vosges Massif, France). *Water Resources Research*, 31(6), 1467-1481.
- Anderson, M.P. and Woessner, W.W. (1992) The role of postaudit in model validation. *Advances in Water Resources*, 15, 167-173.
- Beven, K. (1996) A discussion on distributed hydrological modelling. In: *Abbott, M.B. and Refsgaard, J.C. (Eds): Distributed Hydrological Modelling*, 255-278, Kluwer Academic Publishers.
- Dee, D.P. (1995) A pragmatic approach to model validation, In: D.R. Lynch and A.M. Davies (Eds) *Quantitative skill assessment of coastal ocean models*, AGU, Washington, 1-13.
- De Marsily, G., Combes, P. and Goblet, P. (1992) Comments on 'Ground-water models cannot be validated', by L.F. Konikow and J.D. Bredehoeft, *Advances in Water Resources*, 15, 367-369.
- Flavelle, P. (1992) A quantitative measure of model validation and its potential use for regulatory purposes. *Advances in Water Resources*, 15, 5-13.
- Jayatilaka, C.J., Storm, B. and Mudgway, L.B. (1998) Simulation of water flow on irrigation bay scale with MIKE SHE. *Journal of Hydrology*, 208, 108-130.
- Konikow, L.F. (1978) Calibration of groundwater models. In: *Verification of mathematical and physical models in hydraulic engineering*, American Society of Civil Engineering, New York, 87-93.
- Konikow, L.F. and Bredehoeft, J.D. (1992) Ground-water models cannot be validated. *Advances in Water Resources*, 15, 75-83.
- Klemes, V. (1986) Operational testing of hydrological simulation models. *Hydrological Sciences Journal*, 31, 13-24.
- Larsson, A (1992) The international projects INTRACOIN, HYDROCOIN and INTRAVAL, *Advances in Water Resources*, 15, 85-87.
- Lidén, R (2000) Conceptual runoff models for material transport estimations. PdD dissertation. Report No 1028, Lund Institute of Technology, Sweden.
- Oreskes, N., Shrader-Frechette, K. and Belitz, K. (1994) Verification, validation and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science*, 264, 641-646
- Refsgaard, J.C. and Knudsen, J. (1996) Operational validation and intercomparison of different types of hydrological models. *Water Resources Research*, 32(7), 2189-2202.
- Refsgaard, J.C. (1997) Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of Hydrology*, 198, 69-97.
- Schlesinger, S., Crosbie, R.E., Gagné, R.E., Innis, G.S., Lalwani, C.S., Loch, J., Sylvester, J., Wright, R.D., Kheir, N. and Bartos, D. (1979) Terminology for model credibility. SCS Technical Committee on Model Credibility. *Simulation*, 32(3), 103-104.
- Styczen, M. (1995) Validation of pesticide leaching models. In: *Leaching models and EU registration*. Final report of the work of the Regulatory Modelling Work Group of FOCUS (FORum for the Co-ordination of pesticide fate models and their USE), DOC.4592/VI/95, European Commission.
- Tsang, C.-F., (1991) The modelling process and model validation. *Ground Water*, 29, 825-831.

Kapitel 12 MODELLENS REPRÆSENTATIVITET

Torben Obel Sonnenborg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelantagelser, modelbegrænsninger, modeltroværdighed, modelanvendelse

ABSTRACT: Når modelkalibrering og –validering er gennemført skal modellens repræsentativitet vurderes. Dette inkluderer en vurdering af modelopsætning, hvor modellens begrænsninger skal identificeres og præciseres. Modellens troværdighed som redskab til simulering af forskellige hydrologiske variable skal så vidt muligt kvantificeres ud fra resultaterne af kalibrering og validering. Desuden skal det specificeres, hvilke opgavetyper og typer af naturlige eller menneskeskabte påvirkninger, modellen vurderes at kunne behandle.

12.1 INDLEDNING

Når modellen er opstillet, kalibreret og valideret, er den klar til at blive anvendt og producere resultater, der kan opfylde formålet med modelarbejdet. Inden dette arbejde sættes i gang, eventuelt af en anden part end udviklerne af modellen, skal modellens begrænsninger præciseres. Det skal beskrives, hvilke simplificerende antagelser der er foretaget ved opstillingen af modellen, og hvordan simplificatorerne påvirker anvendeligheden af modellen. Implikationer af kalibrerings- og valideringsresultat skal beskrives. Det skal beskrives, hvilke opgavetyper modellen er i stand til at løse. Gennemgangen af modellens repræsentativitet vil med fordel kunne indgå som grundlag for fase 3 i modeludviklingen "Milepæl 3: Review af kalibrering, validering og usikkerhedsanalyser" defineret i kapitel 17.

12.2 MODELANTAGELSER

Ved opstilling af en grundvandsmodel foretages der en række forenklinger af det naturlige system, som er nødvendig for kunne formulere problemet numerisk. Processerne, geologien, randbetingelser, m.m. vil altid blive beskrevet på en forenklet måde, hvor graden af simplificatorer dels afhænger af tekniske modelfaktorer, dels vurderinger af udbyttet ved en given grad af kompleksitet i forhold til formålet med modellen. I det følgende vil modelapproksimationer og forsimplinger med resulterende implikationer for modelsimuleringerne blive eksemplificeret. Det skal ikke opfattes som et forsøg på at give en dækkende beskrivelse af mulige modelapproksimationer, da listen over mulige forsimplinger er næsten uendelig. Det er imidlertid hensigten, at de beskrevne eksempler skal tjene til at bidrage med at anskueliggøre, hvad hensigten og formålet med analysen af modellens repræsentativitet er.

12.2.1 Procesbeskrivelser

Der kunne teoretisk set benyttes distribuerede, fysisk baserede metoder til beskrivelsen af hvert enkelt af de involverede processer. Afhængig af formålet med modelleringsarbejdet, vil det ofte være hensigtsmæssigt at simplificere en eller flere af procesbeskrivelserne. I sådanne tilfælde er det essentielt at præcisere, hvilke processer der beskrives approksimativt, og hvilke implikationer det har på modellens resultater.

I forbindelse med grundvandsmodellering vil der kunne anvendes forenklede procesbeskrivelser på primært følgende områder: (1) Strømningen i den mættede zone, (2) Infiltration/eksfiltration til/fra grundvandsspejlet, (3) Vandudveksling med vandlegemer såsom søer, vandløb og havet. I det følgende gives to eksempler på modelantagelser, der relaterer sig til (1) og (2) ovenfor, og de resulterende implikationer for modelanvendeligheden vurderes.

I det tilfælde, hvor den mættede lagtykkelse af et frit magasin er stor i forhold til de sæsonmæssige fluktuationer af vandspejlet, kan det være forbundet med en relativ lille fejl at benytte ligningssystemet for et artesisk magasin, lign. (1.14), til at beskrive strømningen i magasinet. Det skal imidlertid pointeres, at modellen sandsynligvis vil være uegnet til at beskrive et eventuelt oppumpningsscenario fra det frie magasin, hvor den mættede lagtykkelse og dermed transmissiviteten ændres betydeligt. Modellen vil med andre ord have begrænsede anvendelsesmuligheder, hvilket skal fastslås, så misbrug af modellen undgås.

DK-modellens infiltrationsbeskrivelse (Henriksen et al., 1997) er et andet eksempel på en procesforsimpling. Infiltrationen til grundvandszonen beskrives her vha. en selvstændig boksmodel, der på basis af potentiel fordampning og en vandbalance for rodzonen beregner den aktuelle fordampning, hvorved nettonedbøren findes. Da nettonedbøren påføres grundvandszonen direkte, vil forsinkelsen gennem den umættede zone ikke kunne beskrives. Desuden vil ændringer i grundvandsspejlets beliggenhed med denne beskrivelse ikke få nogen indflydelse på f.eks. den opadgående strømning fra grundvandet. Løsningen for variabelen af primær interesse (i dette tilfælde trykniveauet i mættet zone) vil have indflydelse på inputtet til modellen, infiltrationen (eller eksfiltrationen). Denne dynamik kan ikke beskrives ved anvendelse af en ikke koblet beskrivelse af de to processer. Der kan resulterende forventes unøjagtigheder i modelresultaterne, specielt i områder, hvor grundvandsspejlet står højt (f.eks. vådområder) og dybden til vandspejlet kan have stor indflydelse på størrelsen af den aktuelle fordampning.

12.2.2 Geometriske og geologiske forsimplinger

Valget af geometriske repræsentation af det aktuelle grundvandsmagasin vil naturligvis have stor indflydelse på modellens resultater (2D-, quasi-3D-, eller fuld 3D-model). Det skal derfor beskrives, hvilken indflydelse den valgte opløsning af magasinets rumlige variabilitet har på typen af resultater, modellen kan generere.

Det vil altid være vanskeligt at beskrive den geologiske heterogenitet i en numerisk model. Ved opstilling af modeller på en skala over 10^3 m vil det normalt ikke være muligt at inkludere småskalaheterogenitet eksplicit i modellen. Det er derfor nødvendigt at antage, at det heterogene medium kan beskrives ved effektive parametre, der udtrykker effekten af heterogeniteten.

F.eks. vil opsprækkede formationer (typisk opsprækket moræneler, opsprækket kalk) i hydraulisk henseende blive behandlet som et ækvivalent porøst medium (EPM). Derved forudsættes, at det samlede system af sprækker og matrix kan beskrives ved ét sæt hydrauliske parametre (ledningsevne, magasinkoefficient, m.m.). Selv om vandfluxen gennem den opsprækkede formation i gennemsnit kan beskrives tilfredsstillende ved passende valg af effektive parametre, vil det være tvivlsomt, om strømningshastigheder eller opløst stoftransport umiddelbart kan simuleres med denne formulering, og der er derfor grund til at pointere, at modellen skal anvendes med varsomhed i forbindelse med vurdering af f.eks. transporttider eller forureningstransport.

De samme forhold som anført for det opsprækkede medium ovenfor gør sig gældende for andre typer af heterogenitet (f.eks. lagdelte formationer) om end i mindre udtalt grad. Her vil det ofte være muligt at inkludere en del af den forekommende heterogenitet, afhængig af hvilken geologisk tolkningsmetode der anvendes, og på hvilken skala tolkningen foretages. Det skal derfor fremgå, hvilken type tolkning der er anvendt, og hvorledes metoden forventes at influere på modelsimuleringerne.

12.2.3 Randbetingelser

De mest stabile randbetingelser, der kan anvendes i en numerisk grundvandsmodel, er de såkaldte fysiske grænser, som er karakteriseret ved veldefinerede strukturer i systemet, som udgør naturlige grænser for grundvandsstrømningen. Lavpermeable bjergarter, vandløb og havet er eksempler på naturlige fysiske grænser, der er velegnet som randbetingelser til den numeriske model. Det kan imidlertid være vanskeligt at repræsentere selv relativt veldefinerede grænser i en numerisk model, hvilket nedenstående eksempel illustrerer.

I DK-model Fyn (Henriksen et al., 1997), som omgives af havet langs hele periferien, er grænsen til havet anvendt som fastholdt trykrandbetingelse for samtlige beregningslag i modellen. Her ved introduceres to fejl: (1) Da modellen ikke inkluderer densitetseffekter, kan skillefladen mellem fersk og salt vand ikke simuleres, og den præcise placering af modelranden er derfor ukendt. (2) Kun trykniveauet i det øverste beregningslag burde være fastholdt (for de øvrige lag burde en nul-fluksbetingelse specificeres), men denne opsætning gav numeriske problemer og måtte derfor forkastes. Valget af randbetingelse er dermed fejlbehæftet, og det konkluderes i rapporten, at der er stor usikkerhed forbundet med simulering af forholdene tæt på kysten.

Ofte vil det ikke være hensigtsmæssigt at inddrage de fysiske grænser i modellen. I stedet kan hydrologiske grænser, som typisk udgøres af grundvandsskel eller strømmlinier, anvendes. Disse grænser vil imidlertid være relativt let påvirkelige af indgreb i det naturlige system (f.eks. oppumpning eller kunstig vanding). Det er i dette tilfælde ønskeligt at få kvantificeret gyldigheden af de valgte randbetingelser, hvilket i forbindelse med oppumpning kan gøres relativt let ved anvendelse af en simpel analytisk brøndløsning, hvorved sænkningstragtens rumlige udbredelse kan bestemmes som funktion af boringsplacering og oppumpet vandmængde. Som minimum skal det gøres klart, at valg af hydrologiske randbetingelser kan resultere i begrænsninger for modellens anvendelighed.

Tilsvarende problemer gør sig gældende, når randbetingelser til en lokal model genereres af en regional model. Da den opstrøms randbetingelse til lokalmodellen er genereret af regionalmodellen (f.eks. fluxrandbetingelse), vil den lokale model kun kunne anvendes til analyser, der ikke inkluderer indgreb, som påvirker størrelsen af fluxen over randen. I modsat fald skal regionalmodellen anvendes igen til at generere nye randbetingelser.

12.3 MODELLENS TROVÆRDIGHED

Et godt kalibreringsresultat udtrykt i overensstemmelse mellem observationsdata og simuleringresultater er ikke i sig selv et mål for høj modeltroværdighed. Et acceptabelt kalibreringsresultat kan godt resultere i et dårligt valideringsresultat, og dermed har modellen ringe anvendelighed og troværdighed. Det forventes imidlertid, at der er en sammenhæng mellem kalibreringsresultatet og valideringsresultatet. Et dårligt kalibreringsresultat vil sandsynligvis resultere i et dårligt valideringsresultat, og det er derfor vigtigt, at kalibreringsresultatet er acceptabelt. Et dårligt kalibreringsresultat kan være resultatet af en ufuldstændig kalibrering af modellen, anvendelse af en for simpel model (f.eks. for grov distribuering af kalibreringsparametrene) eller fejl i den underliggende model (f.eks. den hydrogeologiske tolkningsmodel). Der er derfor grund til at betvivle modellens troværdighed, hvis der er opnået et dårligt kalibreringsresultat, og modellen bør underkastes en analyse med det formål at opnå en bedre overensstemmelse mellem observeret og simuleret værdi i kalibreringsperioden.

Troværdigheden af kalibreringsresultatet kan vurderes mht. de optimerede parametre. Hvis parametrene falder udenfor fysisk acceptable grænser (se afsnit 10.4), vil modellens troværdighed reduceres. Det samme vil være tilfældet, hvis de optimerede parametre vurderes at være forbundet med stor usikkerhed, f.eks. udtrykt ved et bredt konfidensinterval eller lav modelsensitivitet.

Modellens troværdighed er i høj grad relateret til resultaterne af valideringen. En generel dårlig reproduktion af målingerne vil naturligvis være et udtryk for en upålidelig model. I de fleste tilfælde vil modellen imidlertid være i stand til at simulere det fysiske system med variabel præcision. I

nogle områder vil data være bedre reproduceret end i andre, ligesom en ikke-stationær model kan simulere systemets respons bedre til nogle tidspunkter end andre (svarende til f.eks. våd og tør periode). Det er vigtigt at præsentere, hvor/hvornår modellen giver nøjagtige resultater, og specielt hvor/hvornår der er problemer. Det er muligt, at de upræcise resultater optræder i områder eller som følge af hydrologiske input, som det er mindre vigtigt at få beskrevet af modellen i forhold til det aktuelle formål med arbejdet. På trods af relativt store afvigelser mellem observationer og simuleringer, kan modellen derfor være troværdig til løsning af det aktuelle problem, hvori-mod den ikke nødvendigvis vil være det til andre formål.

Selv om modellen ikke er i stand til at simulere eksempelvis det absolutte trykniveau korrekt i kalibrerings- og valideringsperioden, kan den muligvis godt være i stand til at reproducere variationerne i trykniveauet som følge af årstidsvariationer i de hydrologiske input eller specificerede påvirkninger. Ofte vil det simulerede trykniveau i den situation være forskudt op eller ned i forhold til det observerede forløb, og simuleringen kan derfor vurderes som rimelig til trods for at det rigtige niveau ikke er ramt. Der vil derfor være stor sandsynlighed for, at modellen kvalitativt kan forudsige systemets respons på en given påvirkning (f.eks. øget grundvandsindvinding). Modellen kan dermed give vigtige resultater om systemets relative ændringer til trods for at den kvantitativt ikke er i stand til at simulere systemet korrekt.

Dårlige resultater i valideringen vil afdække eventuelle problemer med modellens prediktive evner (se kapitel 11). I de tilfælde, hvor kalibreringsfasen gav god overensstemmelse mellem observationer og modelsimuleringer, vil problemer med valideringsresultatet eller troværdigheden af parameterestimaterne primært kunne tilskrives to faktorer: (1) Der kan være problemer med overparametrisering (se kapitel 4 og 11). Der er derfor grund til at forenkle den formulerede model og rekalkibrere modellen (eventuelt med et dårligere kalibreringsresultat til følge). (2) Det kan være et udtryk for, at kvantiteten og/eller kvaliteten af datagrundlaget, hvorpå kalibreringen fandt sted, var for ringe. Det vil derfor være relevant at indsamle yderligere data, hvis kravene til modellens præstationer skal bibeholdes. I modsat fald er det nødvendigt at acceptere, at modellens pålidelighed vil være begrænset.

12.4 MODELANVENDELSE

12.4.1 *Typer af tilstandsvariable, der kan simuleres*

Nøjagtigheden, hvormed en given type tilstandsvariabel forventes at kunne simuleres af modellen, afhænger i høj grad af, hvilke observationstyper, der indgik i kalibrering og validering, samt af, hvor godt observationsdata blev simuleret i de to faser. Hvis f.eks. observationer af hydraulisk trykniveau indgik i kalibreringen af modellen, og de opstillede kalibreringskriterier blev opfyldt for denne datatype, vil det kunne forventes, at foruden trykniveauet vil fluxen gennem reservoiret (jvnf. Darcys lov, lign. 1.6) kunne predikteres med en rimelig nøjagtighed. Til gengæld vil det være svært at vurdere, hvor godt modellen vil kunne simulere f.eks. strømningshastighed og stoftransport. Dels kan der rejses tvivl om, hvorvidt de effektive parametre, der repræsenterer Darcys lov, også er optimale i forbindelse med transportberegninger. Dels vil den effektive porøsitet være ukendt. Det skal derfor beskrives, hvor præcist det vurderes, at relevante tilstandsvariable kan forudsiges af modellen, og det skal præciseres, hvilke typer anvendelse modellen er valideret til.

12.4.2 *Skala hvorpå modellen arbejder*

Skalaen, hvorpå en given tilstandsvariabel forventes at kunne simuleres med rimelig nøjagtighed, skal ligeledes specificeres. Den rumlige diskretisering afgør, på hvilken skala en given variabel kan modelleres. F.eks. kan det ikke forventes, at den model med en cellestørrelse på 200 x 200 m kan reproducere punktmålinger af vandmætning i umættet zone. I bedste fald vil modellens resultat repræsentere et gennemsnit af vandindholdet indenfor cellen, og denne værdi vil være bekostelig, arbejdskrævende og tidskrævende at bestemme ud fra målinger. Man vil derfor være i en situation,

hvor det ikke skal forventes, at modellens resultat kan testes mod feltdata eller anvendes direkte til forudsigelse af det virkelige systems tilstand i et givet punkt.

Andre variable vil være repræsenteret på forskellige skalaer, og det vil derfor være hensigtsmæssigt at kvantificere, på hvilken skala de simulerede værdier kan repræsentere målte værdier. F.eks. vil nøjagtigheden, hvormed grundvandstilstrømning til vandløb kan bestemmes, være en funktion af oplandsstørrelsen i forhold til cellestørrelsen (jvnf. afsnit 10.2.2). Modellen skal derfor ikke forventes at kunne beskrive eksempelvis ændringer i minimumsvandføring for vandløbsstrækninger med et lille opland (i forhold til cellestørrelsen). I DK-model Fyn (Henriksen et al., 1997) vurderes det, at oplandet skal have en størrelse på mindst 50 km², for at modellen kan simulere vandudvekslingen med acceptabel nøjagtighed (cellestørrelse på 1 km²).

12.4.3 Hvilken type modellering kan modellen anvendes til?

På baggrund af den ovenfor beskrevne analyse af modellens antagelser, troværdighed, m.m. vil det være muligt at vurdere, hvilke typer anvendelser modellen kan have. I første omgang skal det vurderes, hvorvidt modellen vil være egnet som fortolkningsværktøj og/eller prognoseværktøj.

Kravene til modellen er mindst stringente, hvis den kun skal anvendes som fortolkningsværktøj, hvor en analyse af det fysiske systems sammenhænge kan foretages. Der stilles ikke krav til modellens prediktive egenskaber, da den ikke skal kunne gøre rede for, hvordan det beskrevne system udvikler sig eller reagerer på hydrologiske påvirkninger, der afviger fra de aktuelle. Derfor vil en velgennemført kalibrering være tilstrækkelig til, at modellen kan anvendes til at analysere eksempelvis strømningsretning eller modellens sensitivitet overfor de indgående parametre.

Hvis modellen skal kunne anvendes som et prognoseværktøj, skal der desuden stilles krav til modellens prediktive egenskaber. I første omgang kan der være tale om en undersøgelse af, hvordan det eksisterende system udvikler sig, hvis der ikke foretages ændringer i systemet. Gennemførelse af en validering af modellen vil her være en forudsætning for at kunne vurdere, hvor godt modellen vil egne sig til denne type anvendelse.

Hvis modellen også skal kunne bruges til at kvantificere, hvilke konsekvenser alternative indgreb i systemet vil have (beslutningsværktøj), bliver kravene til modellen yderligere skærpet. Dels skal modellen være robust overfor de påtænkte indgreb (jvnf. diskussionen af procesbeskrivelser og randbetingelser i afsnit 12.2.1 og 12.2.3). Dels vil en vurdering af modellens anvendelighed til dette formål afhænge af, hvilke typer af naturlige og menneskeskabte påvirkninger, den har været udsat for i kalibrerings- og valideringsfasen. Det vil eksempelvis være en fordel, hvis der har været inkluderet meget våde eller tørre perioder, eller hvis prøvepumpningsforsøg alternativt nye boringer/kildepladser er med i kalibrerings- eller valideringsperioden. Af andre påvirkninger, som det vil være fordelagtigt at inddrage, kan nævnes ændringer i arealanvendelse, kunstig vanding, dræning og vandbygningværker (diger, dæmninger og andre konstruktioner).

12.5 REFERENCER

Anderson, M.P., Woessner, W.W. (1992) Applied groundwater modeling. Simulation of flow and advective transport. Academic Press, San Diego, California, USA.

Henriksen, H.J., Knudby, C.J., Rasmussen, P., Nyegaard, P. (1997) National vandressource model. Modelopstilling og kalibrering for Fyn. GEUS undersøgelses rapport 1997/139.

Kapitel 13 ANVENDELSE AF MODELLEN: VANDBALANCE, GRUNDEVANDSDANNELSE OG INDVINDINGSOPLANDE

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Referencekørsel, udnyttelig grundvandsressource, kumulativ fordelingsfunktion, kvalitetsmæssig og recipientmæssig bæredygtig ressource, management scenarier, grundvandsdannelse, transport- og opholdstider, partikelbanemodel, sensitivitetanalyse, usikkerhedsvurdering, best estimate, Monte Carlo simuleringer

ABSTRACT: Beskrivelse af simuleringer i udbudsmaterialet. Valg af referencekørsel. Demonstration af modellens anvendelighed ved gennemførelse af et begrænset antal simuleringer. Brug af model som prognoseværktøj. Vurdering af den udnyttelige grundvandsressource. Beskrivelse af grundvandsdannelse med kumulativ fordelingsfunktion. Afgrænsning af områder med opadrettede eller nedadrettede gradienter. Vurdering af grundvandsdannelse til øvre og dybe magasiner. Afgrænsning af grundvandsdannende oplande ved 3D partikelbanesimuleringer. Vurdering af transporttider og opholdstider. Metoder til beskrivelse af usikkerheden i forbindelse med simuleringsscenarier.

13.1 INDLEDNING

Det er vigtigt, uanset hvilke typer undersøgelser der skal foretages, at de simuleringer der skal udføres med en grundvandsmodel er relativt udførligt beskrevet i udbudsmaterialet (og i formålet) og at de er afgrænsede i antal, og præcist beskrevne med hensyn til:

1. Definer antal simuleringsscenarier og typen på disse (fx scenarier med forskellige kombinationer af pumpeydelse incl. evt. tidslig variation, påtrykte klimavariationer etc.); det er vigtigt her at specificere hvilke udtræk der skal foretages fra simuleringsscenarierne, fx påvirkning af trykniveau (afsænkning), påvirkning af vandføring (minimumsvandføring) og fastlæggelse af relationer mellem grundvandsdannende oplande og enkelte kildepladser.
2. Specificer hvilket hydrologisk datasæt og tidsperiode der skal anvendes (fx en gentagelse eller genanvendelse ("recykling") af kalibrerings- og valideringsperioden eller en udvalgt delperiode). Beskriv at der fx ønskes gennemført simuleringer ud fra ændret nettonedbør, eller at nedbøren skal korrigeres i simuleringerne.
3. Beskriv hvordan følsomhed og usikkerhed skal håndteres og indgå i simuleringerne

Der bør vælges en referencekørsel som de øvrige simuleringer kan relateres til. Denne referencekørsel kan være baseret på enten en situation uden vandindvinding eller en situation med nuværende vandindvinding. Referencekørslen bør omfatte en udvalgt periode, og det kan evt. besluttes at genanvende en udvalgt periode, med henblik på at arbejde på de samme veldefinerede klimatiske betingelser. Krav til en passende opvarmningsperiode (jf. kapitel 9) bør naturligvis honoreres ved dimensionering af beregningsperioder.

Første trin kan være at lave en simulering med modellen for referencekørslen. De øvrige simuleringer kan i så fald sammenlignes med denne. Referencekørslen kan med fordel udvælges så den klimatiske svarer til kalibrerings- og simuleringssperioden, men med en simulering hvor vandindvindingen nulstilles (altså en kørsel uden oppumpning). En anden mulighed er at benytte en referencekørsel med de nuværende oppumpningsforhold. Referencekørslen bør fastlægges så der er enighed om denne mellem modellør, rekvirent og evt. reviewer, før simuleringsscenarierne udarbejdes.

Andet trin består efterfølgende i at køre modellen med nogen få udvalgte scenarier med ændrede oppumpnings-, klima- og arealanvendelsesscenarier, med henblik på i første omgang at præsentere og demonstrere modellens anvendelighed som et værktøj til at beskrive forskellige typer påvirkninger overfor rekvisenten. Kapaciteten kan typisk omfatte simuleringer af:

- Grundvandsressourcevurdering og vandbalanceforhold
- Afgrænsning af områder med opadrettede- eller nedadrettede gradienter
- Grundvandsdannelse til øvre grundvandsmagasiner
- Grundvandsdannelse til dybe magasiner
- Grundvandsdannende oplande og indvindingsoplande til magasiner og/eller kildepladser/boringer
- Transport- og opholdstider i forskellige grundvandsmiljøer
- Sensitivitets- og usikkerhedsvurdering

Disse simuleringsscenarier skal efterfølgende sammenlignes, dokumenteres og drøftes, før der gennemføres yderligere scenarier. De yderligere simuleringsskørsler bør i øvrigt omfatte mere ekstreme påvirkninger af det hydrologiske system, med hensyn til afgrænsning af en bred vifte af randbetingelser.

Traditionelt har det været mest almindeligt at benytte modeller som prognoseværktøj der beskriver den fremtidige tilstand for et grundvandssystem i form af "absolutte" resultater (fx med kvantificering af bæredygtig udnyttelig grundvandsressource), i stedet for "relative" resultater (med identifikation af fx hvilken fremtidig kildepladsplacering eller fordeling af indvindingen over en række kildepladser, der medfører den mindste "reduktion" i fx vandføringen ved for et udvalgt vandløbssystem). Normalt vil en model kunne simulere påvirkningen af et givent system væsentligt mere præcist med beregning i "relative" størrelse, end den vil i forhold til "absolutte" størrelser. Det er derfor særligt vigtigt at kunne sætte tal på nøjagtigheden og troværdigheden af simuleringresultater ved en numerisk grundvandsmodellering, således at modellens "anvendelighed" i forbindelse med den videre brug (management beslutninger) er klart forstået hos brugeren. Simuleringer af behov for reguleringer af fx udvaskningen af nitrat, eller afværgetiltag overfor punktkilder udgør eksempler på "absolutte" simuleringer, ligesom at vurderinger af grundvandsressourcens størrelse ligeledes tilhører denne kategori.

13.2 GRUNDTVANDSRESSOURCEVURDERING OG VANDBALANCEFORHOLD

Når en model er kalibreret og valideret på baggrund af historiske data typisk af 10 års varighed, er den egnet til simuleringer af grundvandsressourcens størrelse og vandbalanceforhold, på et detaljeret ("high fidelity") niveau.

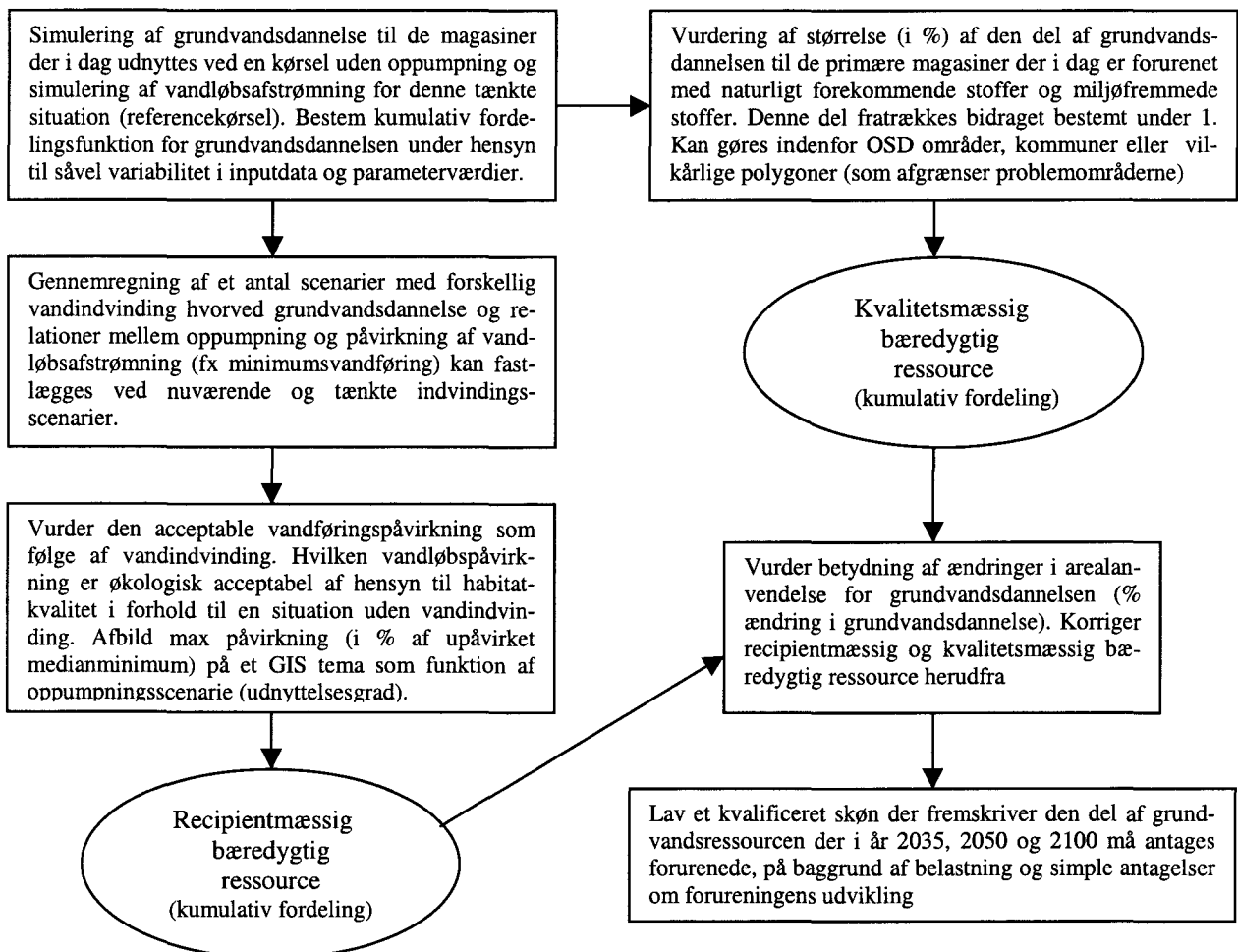
Simuleringer gennemføres ved at køre modellen frem med de tilpassede og kalibrerede parametre, og påtvinge modellen en hydrologisk belastning. Der kan her benyttes inputdata i form af fx nedbør- og fordampningstidsserier, der repræsenterer fremtidige klimaforhold, men det kan også vælges at genanvende en relevant delperiode (Henriksen et al, 1998). Fremtidig ændret udnyttelse af grundvandsressourcen bør så vidt muligt inddrages.

Management scenarier vil som regel bestå af kombinationer af forskellige pumpeydelse, klimaforhold og evt. arealanvendelse, med en fordeling på forskellige eksisterende eller fremtidige kildepladsplaceringer, der opfylder et givent mål. Dette mål kan være at forøge eller optimere den samlede ressource-udnyttelse i et område, at optimere eller reducere påvirkningen fra vandindvinding på følsomme overfladevandsrecipienter eller vådområder, at begrænse risikoen for saltvandsindtrængning eller -oprængning fra saltholdige geologiske lag og at vurdere den nuværende og fremtidige udvikling i vandkvalitet, som følge af naturligt forekommende stoffer og miljøfremmede stoffer i et område, med henblik på fx vurdering af restressourcen af rent vand (eller forurenede ressourcer).

Vurdering af den udnyttelige grundvandsressource under hensyn til vandkvalitet, recipientpåvirkning mm. er en kompliceret og til dels politisk bestemt "øvelse". I forbindelse med "Klassificering af grundvandsressourcen" (Miljøstyrelsen, 1995) foreligger der en metodik til kvantificering af

grundvandsmængden, med bestemmelse af maksimalt udnyttelig grundvandsressource og bæredygtig ressource. Den her anbefalede metode er baseret på en massebalance for grundvandssystemet, hvor input (=grundvandsdannelsen) bestemmes ud fra output (=oppumpning + vandløbsafstrømning + evt. underjordisk afstrømning til fx havet). Kernen i en opgørelse af grundvandsressourcens størrelse er dermed en bestemmelse af "grundvandsdannelsen" til de primære magasiner, hvorfra størstedelen af vandindvindingen foretages. Der er imidlertid et problem ved denne metodik, idet der, bortset fra udnyttelse af grundvandsressourcen for frie magasiner fx hedesletteområder, ikke findes en "unik" løsning. Jo større vandindvinding, desto større grundvandsdannelse og dermed en større ressource. Herefter skal der foretages fradrag i forhold til naturlige og miljøfremmede stoffer, men størrelsen af dette fradrag kan være vanskelig at kvantificere, således at metoden rummer en fare for at overvurdere ressourcens størrelse i områder med intensiv vandindvinding, uden at tage hensyn til en evt. overudnyttelse af ressourcen, som først viser sig måske mange år efter at systemet er bragt ud af balance.

I forbindelse med DK-modellen (Henriksen et al, 1998) og i synopsis for den afsluttende temarapport om vandets kredsløb er der derfor foreslået en ny metode, hvor der i stedet for den aktuelle grundvandsdannelse tages udgangspunkt i den "naturlige grundvandsdannelse" uden vandindvinding. Denne kan meget let vurderes i områder hvor der foreligger en kalibreret og valideret grundvandsmodel, ved blot at lave en kørsel uden oppumpning. Det giver følgende metodik til vurdering af bæredygtig grundvandsressource:

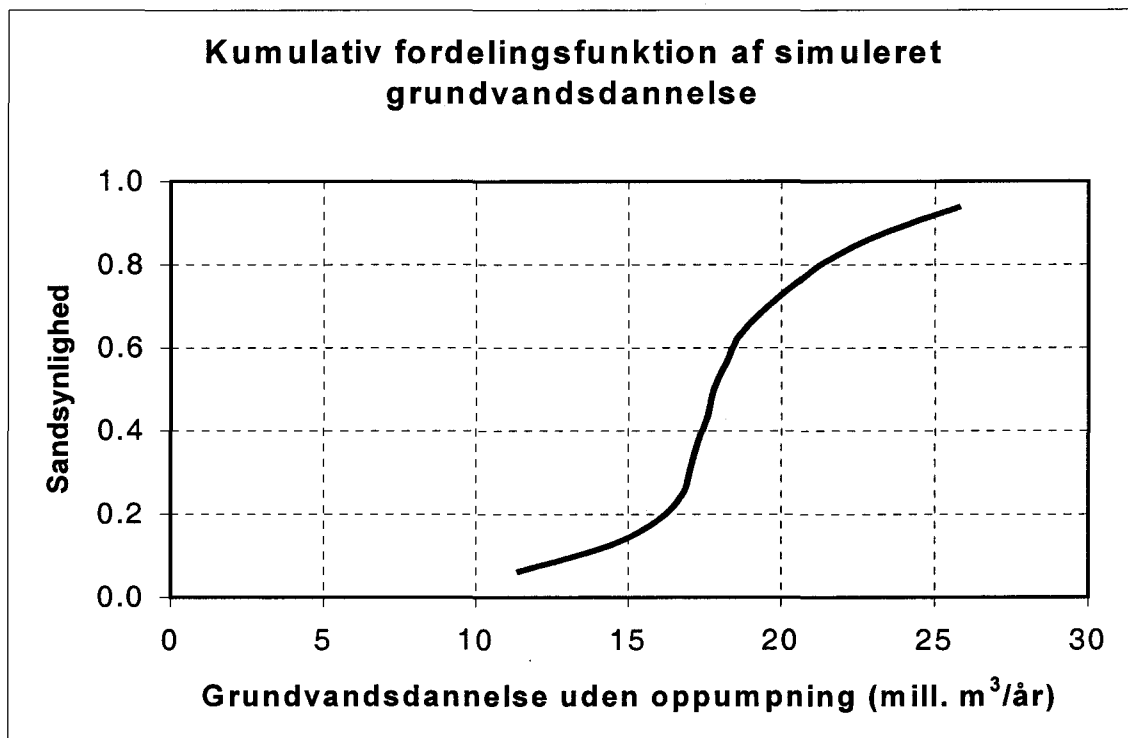


Figur 13.1 Vurdering af udnyttelig grundvandsressource

Numeriske grundvandsmodeller kan bidrage til kvantitative beskrivelser af grundvandsdannelsen, men langtids-gennemsnitsværdier er følsomme i forhold til længden af perioden der midles over og starttidspunktet for simuleringsperioden.

En pragmatisk metode at løse dette problem på kan være at foretage en "tilfældig" udvælgelse af data til simuleringen, på baggrund af historiske data for fx en 20 års periode. Hvis det fx antages at en "treårs-periode (=36 måneder)" er den relevante "kritiske længde på simuleringsperioden", og den første måned i simuleringsperioden er januar, så består metoden i at tilfældigt at generere et tal mellem 1 og 20, og vælge den tilsvarende januar måned fra 20 års perioden. Herefter genereres et tilfældigt tal for februar og der vælges data fra denne måned i 20 års perioden. Dette gentages indtil der foreligger en enkelt randomiseret realisation med en længde på 36 måneder (samt desuden data for en initialperiode fx 1-3 år, afhængigt af følsomhed overfor initialværdier, genereret på tilsvarende vis), hvorefter modellen køres og der foretages udtræk af grundvandsdannelsen for 3-årsperioden (performance indikator).

Herefter genereres en ny realisation for den 3-årige simuleringsperiode (incl. data for initialperioden), og der laves endnu en simuleringskørsel og udtrækkes grundvandsdannelsen (performance indikator) for realisation nr. 2. Denne procedure bør gennemføres et stort antal gange (fx 100), så de beregnede performance indikatorer kan rangordnes og tilknyttes sandsynligheder. Herudfra kan der beregnes en kumulativ fordelingsfunktion med henblik på vurdering af grundvandsdannelsen med en given sandsynlighed (figur 13.2).



Figur 13.2 Eksempel på kumulativ fordelingsfunktion for grundvandsdannelsen her angivet i mill. m³/år (Middlemis, 2000). Kurven viser at der er ca. 10 % sandsynlighed for at grundvandsdannelsen er mindre end 13 mill. m³/år. Der er 10 % sandsynlighed for at grundvandsdannelsen er større end 24 mill. m³/år.

Den resulterende kumulative fordelingsfunktion, se figur 13.2, giver vandressourceforvalteren mulighed for at kvantificere risikoen for at fastsætte en bestemt værdi for den bæredygtige ressource, ligesom at brugere af modellens resultater får bedre indsigt i grundlaget for vurderingen af grund-

vandsressourcens størrelse. Metoden vurderes at være et væsentligt fremskridt i forhold til nuværende metodikker baseret på et "deterministisk" estimat af grundvandsdannelsen (Middlemis, 2000; Merrick, 2000). Den kumulative fordelingsfunktion og estimatet på den afledte totale grundvandsdannelses forudsættes opdateret såfremt den numeriske model for et givent område forbedres og evt. udvides til at dække en længere simuleringsperiode. Denne approach kan benyttes for et helt grundvandsmagasin, eller mindre delområder indenfor modelområdet.

Usikkerhed på fx nedbørsinput kan inddrages ved at afbilde kurver svarende til fx +5, +10 og +20 % større nedbør på diagrammet, ligesom at der kunne udarbejdes forskellige kurver svarende til forskellige "konceptuelle modeller" med forskellige parameterkombinationer som kan antages lige sandsynlige.

Hvis den relevante tidshorisont er meget lang (fx mere end 10 år i stedet for de 3 år i eksemplet ovenfor) så kan det overvejes i stedet at lave en stationær simulering. I dette tilfælde skal der generes gennemsnitsværdier for påvirkningerne af systemet (fx nedbør og vandindvinding) med henblik på multiple kørsler for "tørre", "normale" og "våde" forhold. Disse gennemsnitsværdier udvælges bedst ud fra kumulative fordelingsfunktioner for hver enkelt type påvirkning. De valgte sandsynlighedsmarkører bør aftales på forhånd (fx 20 %, 50 % og 80 %).

13.3 AFGRÆNSNING AF OMRÅDER MED OPADRETTEDE- ELLER NEDADRETTEDE GRADIENTER

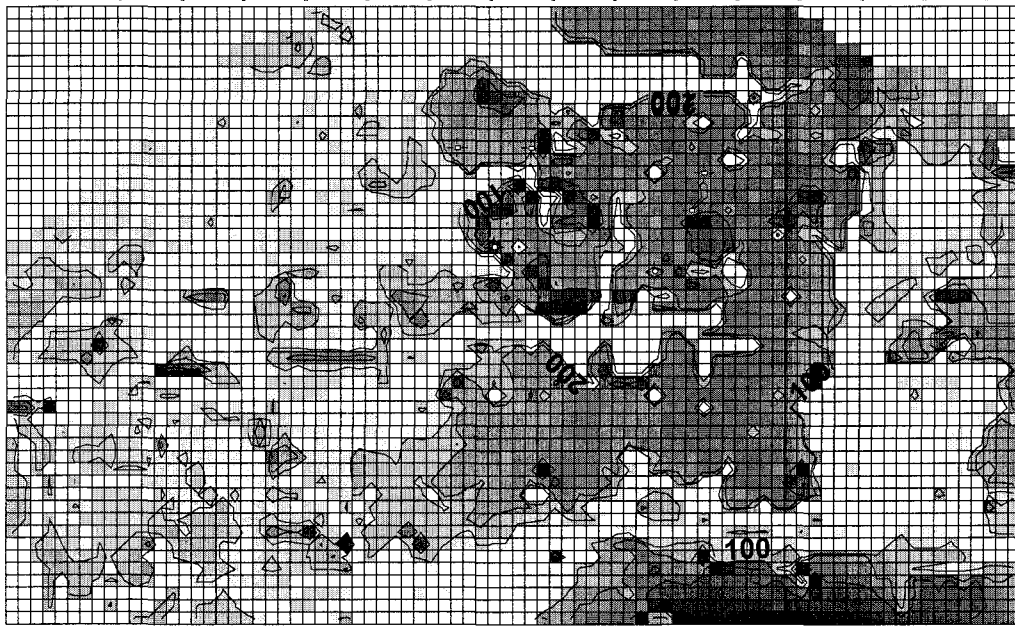
Kendskabet til de grundvandsdannende områders beliggenhed er et afgørende forhold ved vurdering af et grundvandsmagasins risiko for at blive forurenede med stoffer, deponeret eller anvendt ved jordoverfladen. I grundvandsdannende områder er der en nedadrettet vandbevægelse, hvorimod der i udstrømningsområder er opadrettet vandbevægelse.

Tredimensionale grundvandsmodeller er i høj grad baseret på netop at beskrive grundvandets strømning i og mellem grundvandsførende lag. Modeloutput vil blandt andet være et arealdistribueret grundvandspotentialer for de enkelte lag. Afhængigt af hvor avanceret den enkelte model er, kan udstrømningsområder til vandløb, vådområder, søer, fjorde og havet beskrives og analyseres.

I forbindelse med Miljøprojekt 553 (Henriksen et al., 2000) er en modelbaseret afgrænsning af områder med opadrettede og nedadrettede områder nærmere belyst for 3 områder (Østfyn, Ejstrupholm og Sneum å oplandet). Det konkluderes ud fra den afprøvning at kortlægning af infiltrations- og udstrømningsområder kan ske rimeligt præcist, såfremt der indsamles forholdsvis detaljerede synkronpejlinger i et stort antal borer filteret i både øvre og dybere magasin. Ved brug af en 3D grundvandsmodel vil den samme afgrænsning kunne opnås ved et færre antal pejlinger, ligesom at konsekvenser af ændringer i indvinding, nettonedbør og arealanvendelse for gradientforholdene vil kunne vurderes med en grundvandsmodel.

13.4 GRUNDTVANDSDANNELSE TIL ØVRE MAGASINER

Den arealdistribuerede grundvandsdannelses kan ikke kortlægges ved hjælp af simple metoder men forudsætter en grundvandsmodel incl. en god rodzonemodel (Henriksen et al., 2000). I figur 13.3 er vist et eksempel Esbjergmodellen.

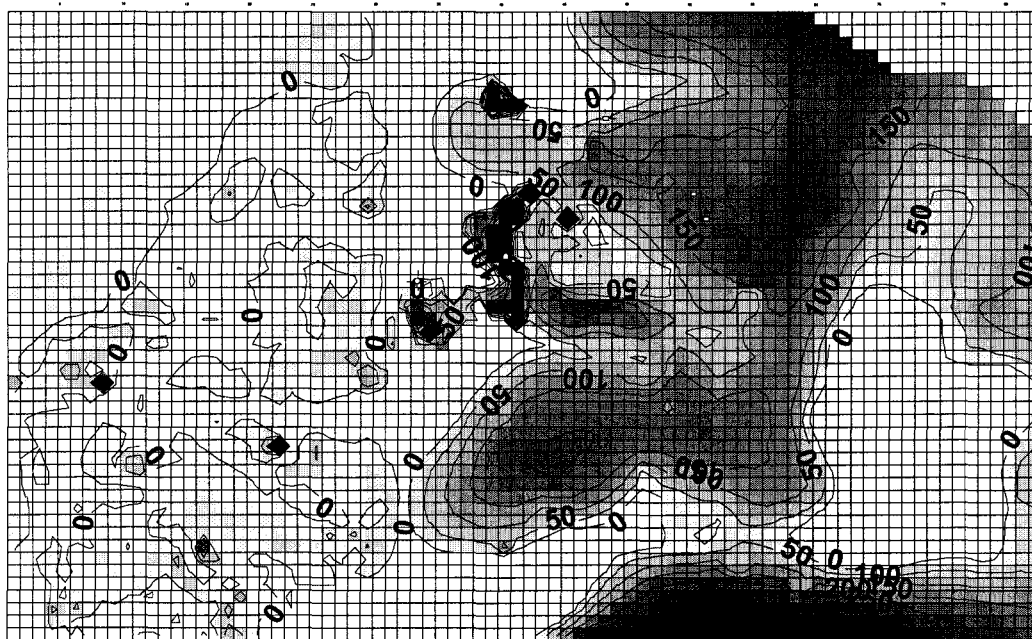


Figur 13.3 Eksempel på simulering af grundvandsdannelse til øvre grundvandsmagasin for Esbjergmodellen (grundvandsdannelse i mm/år). I det mørkegrå område er grundvandsdannelsen i størrelsesordenen 300-500 mm/år. I det hvide områder sker der ingen grundvandsdannelse til de øvre magasiner (udstrømningsområde). Figuren viser resultat for beregningslag nr. 4 svarende til kote -10 m.

Som nævnt i det foregående afsnit kan det anbefales at præsentere resultater jf. principperne i en kumulativ fordelingsfunktion i stedet for "deterministiske" værdier. En mulighed kunne her være udover plottet vist i figur 13.3 også at vise den arealfordelte grundvandsdannelse som svarer til en under-/overskridelsessandsynlighed på 0.1/0.9 for hermed at fastholde en risiko-baseret beskrivelse. Så længe der blot er behov for input til detailkortlægning er dette dog formentlig "at skyde gråspurve med kanoner", hvor man i første omgang vil kunne "klare sig" med at kende fordelingen af grundvandsdannelsen indenfor fx et område med særlige drikkevandsinteresser svarende til $p=0.5$.

13.5 GRUNDVANDSDANNELSE TIL DYBERE MAGASINER

I forhold til beskrivelsen i afsnit 13.4 så er den arealdistribuerede grundvandsdannelse til dybe magasiner langt mere afhængig af forskellige parameter værdier, konceptuel model end af input værdier. I figur 13.4 er vist et eksempel for Esbjergmodellen der illustrere denne forskel (der er vist grundvandsdannelsen til et niveau der stort set svarer til Ribe Formationen).

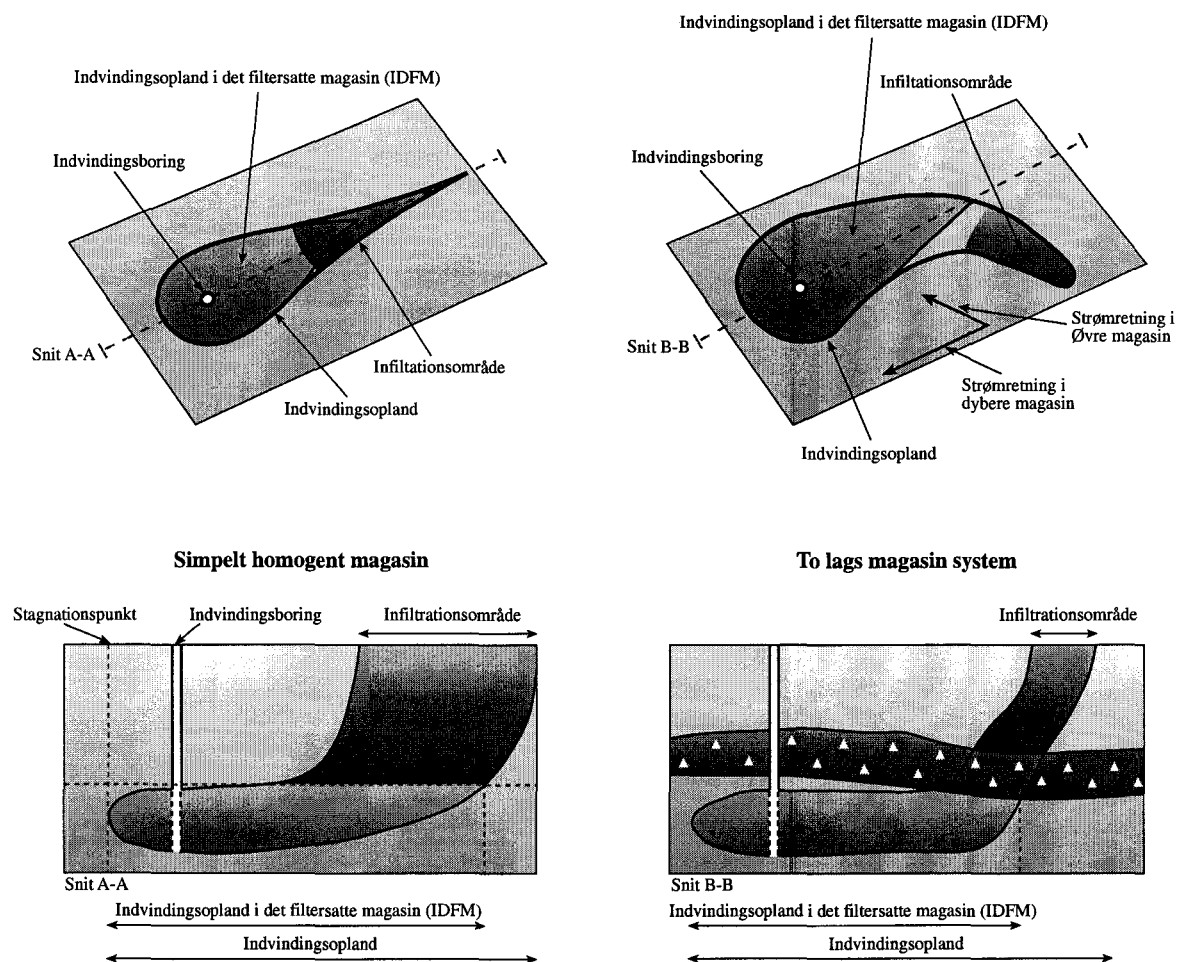


Figur 13.4 Eksempel på simuleret grundvandsdannelse til dybt magasin for Esbjergmodellen. Grundvandsdannelse i mm/år til lag 8 i modellen svarende til Ribe Formationen. I det centrale område er grundvandsdannelsen til Ribeformationen 100-200 mm/år. I et par enkelte områder midt i modelområdet og langs den sydlige rand ses grundvandsdannelser i størrelsesordenen 300-400 mm/år. I den vestlige del er grundvandsdannelsen til lag 8 mere begrænset (0-50 mm/år).

I forbindelse med arbejdet med indsatsplaner vil det være en mulighed at anvende Monte Carlo metodik (metode til gennemførelse af stokastiske analyser hvor fx heterogenitetsforhold og usikkerhed på randbetingelser inddrages ved realisationer af parameterværdier på baggrund af et begrænset antal statistiske parametre – ved metoden præsenteres modelresultater som sandsynligheder) sammen med invers modellering til at beskrive såvel rumlige variationer i dyb grundvandsdannelse samt kumulative fordelingsfunktion der beskriver de tidlige variationer fra år til år, som et grundlag for arbejdet med indsatsplaner og design af monitoringssystemer for indsats områder, se afsnit 13.8.

13.6 GRUNDVANDSDANNENDE OPLANDE OG INDVINDINGSOPLANDE TIL MAGASINER OG/ELLER KILDEPLADSER/BORINGER

Med 3D partikelbanemodel kan der foretages en analyse af indvindingsoplande og infiltrationsområder til de enkelte vandværkers kildepladser samt foretages vurdering af opholdstider (grundvands alder) i forskellige dæklag, grundvandsmagasiner og til kildepladser og indvindingsboringer.



Figur 13.5 Definition af indvindingsopland og infiltrationsområde (Henriksen et al, 2000). Figuren til venstre viser situationen for et vestjysk sandområde uden gennemgående lerlag (boringen er filtersat i et begrænset interval, og indvindingen er i dette tilfælde begrænset). Figuren til højre viser situationen for et tolags magasinssystem.

De forskellige modelkoder har noget forskellig funktionalitet (se bl.a. Henriksen et al, 2000 og kapitel 5 for en nærmere beskrivelse), men i de fleste tilfælde er det forholdsvist let at producere de nødvendige simuleringer, forudsat at modellen er kalibreret og valideret. Nogen koder kan tilmed håndtere såvel afvikling af strømningsmodel og partikelbanemodell "stokastisk".

Partikelbanesimuleringer er en god "illustrator" som er forholdsvist forståeligt for folk der ikke til dagligt arbejder med grundvandsmodeller. Der er imidlertid igen en fare ved at aflevere et "deterministisk" indvindingsopland, og det anbefales at man i stedet foretager en eller anden form for usikkerhedsvurdering, således at betydning af input, parametre, konceptuel model og evt. diskretisering af modellen (skjulte modelfejl som er særligt vigtige i forbindelse med partikelbanesimulering). Visse programmer giver muligheder for forskellige "fangst options" mm (altså mulighed for specifikation af at fx alle partikler der rammer en kasse med oppumpning antages at have i boringer eller en anden antagelse). Præsenter evt. betydning af sådanne valg.

I forhold til en 3D grundvandsmodel forudsætter partikelbanemodeller at modellag er repræsenteret som "true layers" altså med beskrivelse af fx bund af de enkelte lag i modellen og en egentlig 3D beskrivelse. Det er derfor ikke alle strømningsmodeller der er egnede til umiddelbart at anvendes til efterfølgende partikelbanesimulering, og partikelbanesimuleringer bør derfor formuleres i formålet, således at konceptuel model samt valg af kode kan nærmere overvejes i dette per-

spektiv, ligesom en fornuftig ”robust” diskretisering af modellen skal overvejes, så partiklerne ikke ”forsvinder” i evt. interne massebalancefejl. Betydning af antal partikler der ”initielt” eller i hvert tidsskridt sendes afsted i modellen i fx det øverste lag bør ligeledes vurderes. Endelig bør beregningsperioden vælges så en væsentlig del af samtlige ”startede” partikler er nået frem til en boring, et vandløb, et dræn eller en anden randbetingelse (typisk 500-1000 år).

13.7 TRANSPORTTIDER OG OPHOLDSTIDER I FORSKELLIGE GRUNDEVANDSMILJØER

Transporttiden er en væsentlig størrelse i forbindelse med zoner, ikke fordi den er et godt mål for den generelle naturlige beskyttelse, men fordi det er nødvendigt at kende transporttiden såfremt vandkvalitetsdata eller aldersdateringer skal inddrages i forbindelse med kvalitetssikring af en konceptuel model eller en opstillet grundvandsmodel. Transporttiden har desuden betydning for muligheden for sorption, nedbrydning og dispersion af en given forurening for stoffer, selvom der for mange stoffer mangler viden omkring disse forhold i naturlige grundvandsmagasiner.

Brugen af sådanne metodikker er nærmere illustreret for Svendborg området og Vårby å i et notat om kvælstof og vandmiljøplan 2, download notat fra: www.vandmodel.dk.

13.8 FØLSOMHEDS- OG USIKKERHEDSANALYSER

En følsomhedsanalyse er en analyse af simuleringsresultaternes følsomhed overfor ændringer i kalibreringsparametre og andre modelantagelser, fx randbetingelser, hydrauliske parametre og tolkning af geologien. Ved en følsomhedsanalyse analyseres følsomheden overfor den enkelte usikkerhedskilde enkeltvis.

En usikkerhedsanalyse er en systematisk analyse af forskellige usikkerhedskilder (fx klimadata, hydrauliske parametre og geologiske tolkninger) og deres samlede indflydelse på usikkerheden af simuleringsresultaterne.

Ved grundvandsmodellering bør der som et minimum gennemføres følsomhedsanalyser. Afhængig af opgavens målsætning bør det desuden overvejes at gennemføre mere systematiske usikkerhedsanalyser.

Usikkerhedsvurderinger bør tage udgangspunkt i en vurdering og indragelse af følgende usikkerhedskilder:

- Usikkerhed på input variable såsom klimadata.
- Usikkerhed på geologisk tolkning, lagfølger mv. (kategoriske datatyper)
- Usikkerhed på hydrauliske parameterverdier i geologiske mv. lag (kontinuerte datatyper)
- Usikkerhed på modellens procesbeskrivelser

I praksis er det endnu ikke muligt at lave usikkerhedsanalyser, som tager hensyn til alle disse forskellige usikkerhedskilder. Såfremt der anvendes invers modellering er det rimeligt nemt at lave usikkerhedsvurderinger, forårsaget af usikkerhed på parameterverdierne (fx Christensen, 1998; Christensen and Cooley, 1999). Med Monte Carlo metodikker kan man derudover indrage usikkerhed på input variable (fx Refsgaard et al., 1998). Derimod findes der endnu ikke eksempler på hvordan usikkerhed på fx geologiske tolkninger og modellens procesbeskrivelser indrages på systematisk vis. Der er dog en mulighed for at opstille forskellige alternative geologiske tolkninger og eller procesbeskrivelser, kalibrere og validere hver af disse og på den måde inddrage denne usikkerhed.

Mangel på velbeskrevne metoder til omfattende usikkerhedsvurderinger bør imidlertid ikke forhindre at simple metoder anvendes. Resultaterne fra de simple metoder skal blot tages med visse forbehold med hensyn til de absolutte talstørrelser.

Usikkerheder på simuleringer afhænger for det første af modellens troværdighed og her er det naturligvis modellens valideringsresultat (kapitel 11) der udgør grundlaget for såvel en kvalitativ vurdering og i øvrigt input til fx konfidensintervaller og fordelingsfunktioner af udvalgte vigtige modelparametre, såfremt det vælges at foretage stokastiske simuleringer ved fx Monte Carlo tek-

nikker med strømningsmodel, partikelbanemodel og evt. stoftransportmodel. Herved kan de usikkerheder der vedrører hydrauliske parameterværdier indgå direkte i simuleringsscenarier (beregne- de modeloutput).

Hvis der også skal sættes usikkerheder på betydningen af geologisk tolkning, lagfølger og modellen- nes procesbeskrivelser, kan man som nævnt vælge at opstille et antal alternative konceptuelle modeller. Hver af disse modeller skal så kalibreres og valideres fx ved hjælp af invers modellering, således at "spændvidden" i kalibrerings- og valideringsresultat for lige "sandsynlige" modeller kan kvantificeres. Herefter kan fx ressourcens størrelse opgøres med hver enkelt konceptuelle model og betydningen heraf kan vurderes.

Usikkerheden på inputvariable kan normalt indgå ved at der gennemføres simuleringer af fx grundvandsdannelsen med inputværdier der svarer til fx 95 % konfidensgrænser for fx nettonedbø- ren, tal som evt. kan beregnes ved nærmere analyser af inddataværdier (nedbør, fordampning mm.). En anden mulighed er at rangordne output beregnet med forskellige inputværdier, parametre mm. og bestemme udvalgte fraktilværdier (udfra kummulativ fordelingsfunktion af fx beregnede grund- vandsdannelser for en årrække eller for forskellige parameterkombinationer).

Håndtering af usikkerhed kan således behandles med en række forskellige metoder (U.S.Army Corps, 1999):

1. "Best estimate" incl. sensitivitetsanalyse
2. "Bracketed ranges" (udvalgte end-members)
3. "Systematisk" usikkerhedsanalyse

Metode (1) indebærer en kobling med resultater af en sensitivitetsanalyse, med henblik på at benytte en vifte af forskellige akvifer-parametre.

Metode (2) indebærer at der udvælges to eller flere "konceptuelle modeller" eller kalibreringsre- sultater svarende til forskellige parameterkombinationer. Resultaterne af disse bør "indhylle" det samlede problemkompleks' variabilitet. Indhylningsmetodik giver rekvirenten en bedre forståelse af den overordnede modelperformance, svarende til usikkerhed på parameterværdier.

Metode (3) består i at benytte fx invers modellering og/eller Monte Carlo metodik, til en syste- matisk analyse af modelresultater. Parameter- og inputværdier skal her gives en variationsramme (sandsynlighedsfordeling) og resultater returneres som en variationsramme (sandsynlighedsforde- ling). Beregningstid og analyseniveau ved denne typer metodikker er langt mere omfattende end (1) – (2). Fortsat stigende beregningshastigheder på computerhardware og softwareudvikling gør at disse metoder i løbet af de nærmeste år forventes mere udbredte end de er i dag.

Monte Carlo simulering omfatter følgende protokol:

- udvælgelse af vigtige parametre ud fra sensitivitetsanalyse eller invers modellering
- statistisk karakterisering af parametre (fx normal-, log-normal-, trekants- eller uniform- for- deling)
- lav en masse kørsler

I beregningerne kaldes hver "sampling" af parameterkombinationer for en realisation. Få hundrede kørsler antages ofte tilstrækkeligt med henblik på vurdering af middel respons. I forbindelse med ekstremværdianalyser kræves et større antal realisationer for nøjagtigt at kvantificere usikkerheder- ne. Man kan vælge at "post-konditionere" realisationerne, ved at teste hver enkelt benyttende et el- ler andet kriterium (fx kalibreringsstatistik, transporttider mv.). Der findes desuden metoder til at reducere antallet af kørsler og bibring samme kvalitet i resultaterne (fx Latin Hypercube Sampling).

Sammenfattende kan det konkluderes at usikkerheder forekommer som følge af vores ikke komplette kendskab til det fysiske system. Monte Carlo metoden giver mulighed for at adressere denne usikkerhed. I praksis "samples" input parametre til modellen efterfulgt af en simuleringsskør- sel med disse parameterværdier. Resultaterne beregnes og kan anvendes til fx risiko vurdering, cost-benefit analyser mm. Det er nødvendigt at gennemføre et tilstrækkeligt stort antal simuleringer. Resultater præsenteres ofte ved kumulative fordelingsfunktioner (på engelsk cdf plot), kom- plementær fordelings funktion (1-p, på engelsk ccdf plot), eller sandsynligheds densitets funktion (på engelsk probability density function: pdf plot), se fx Ruskauff (1998).

13.9 REFERENCER

- Christensen, S. (1998) Grundvandsmodellens usikkerhed. *Geologisk Nyt*, 2/98, 23-25
- Christensen, S. and Cooley, R.L. (1999) Evaluation of prediction intervals for expressing uncertainties in groundwater flow model predictions, *Water Resources Research*, 35(9), 2627-2639.
- Henriksen, H.J., Troldborg, L., Knudby, C.J., Dahl, M., Nygaard, P., Jakobsen, P.R. og Rasmussen, P. (1998) National Vandressource Model. Sjælland, Lolland, Falster og Møn. GEUS rapport 1998/109.
- Henriksen, H.J., Rasmussen, P. og Knudby, C. (2000) Afprøvning af zoneringsmetoder. Miljøstyrelsen. Miljøprojekt Nr. 553. <http://www.mst.dk/200008publikat/87-7944-191-2/>
- Merrick, N.P. (2000) Probabilistic estimation of aquifer sustainable yield. Compact Disc Proceedings, Xth World Water Congress, Melbourne, March 2000
- Middlemis, H. (2000) Draft groundwater flow modelling guideline. Murray-Darling Basin Commission. July 2000. Aquaterra Consulting Pty Ltd. Western Australia. Project No. 125.
- Miljøstyrelsen (1995) Klassificering af grundvandsressourcen. Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen. Nr. 6 1995.
- Refsgaard, J.C., Thorsen, M., Jensen, J.B., Hansen, S., Heuvelink, G., Pebesma, E., Kleeschulte, S. and Ramamaekers, D. (1998) Uncertainty in spatial decision support systems – Methodology related to prediction of groundwater pollution. In: Babovic, V. and Larsen, L.C. (Eds.): *Hydroinformatics '98, Proceedings of the third international conference on hydroinformatics, Copenhagen 24-26 August 1998*, Balkema, 1153-1159.
- Ruskauff, G.J. (1998) Guide to using stochastic MODFLOW for Monte Carlo simulation (kan downloades fra www.groundwatermodels.com).
- U.S. Army Corps of Engineers (1999) Groundwater Hydrology. Engineering and design. Department of the Army. Washington DC. Engineer Manual 1110-2-1421. CECW-EH.

Kapitel 14 RAPPORTERING AF MODEL OG RESULTATER

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelrapport, executive summary, modelabstract, modelarkivering, modelteknisk approach, hydrogeologisk tolkningsmodel, modelstudieplan og kalibreringsjournal.

ABSTRACT: I forbindelse med et omfattende modelarbejde anbefales det at der udarbejdes en standardiseret modelrapport, executive summary, modelabstract og foretages arkivering af model-setup med indberetning til landsdækkende model metadatabase. Modelrapporten skal klart dokumentere omfanget af den nuværende systemforståelse, kalibrerings- og valideringsresultatet, betydning af usikkerheder på input, parametre, processer og konceptuel model for simuleringresultater og evt. forslag til videre arbejde. Resultater af eksterne reviews bør også klart fremgå.

14.1 INDLEDNING

I forbindelse med afslutningen af et modelarbejde skal der udarbejdes en rapport som beskriver såvel processen som resultaterne. I forbindelse med overslagsberegning/screening vil det ikke altid være relevant at udarbejde en systematisk modelrapport, med et indhold som beskrevet i dette kapitel. Men i forbindelse med detailmodellering (akvifer simulering / "hi fi") er det nødvendigt at der udarbejdes en modelrapport, så man evt. kan arbejde videre med modellen på et senere tidspunkt og så brugere af modellens resultater har mulighed for hurtigt at sætte sig ind i det faglige grundlag for modellens resultater.

Der anbefales i forbindelse med en detailmodellering ("high fidelity modellering") at udarbejde følgende hovedtyper på dokumentation i forbindelse med et grundvandsmodelarbejde:

1. Modelrapport (en faglig rapport der følger en "standarddisposition" til rekvirenten som beskriver grundlaget for modelarbejdet, formål, konceptuel model, valg af kode, modelopstilling, nøjagtighedskriterier, kalibrering, validering, usikkerhedsvurderinger, resultater af simuleringer, konklusioner og anbefalinger)
2. "Executive summary" (en beskrivelse af modelsimuleringer og resultater heraf – indgår ofte som en del af en projekt hovedrapport og indgår også oftest som et eller flere afsnit i modelrapporten; her nævnt særskilt fordi man i forbindelse med "overslagsberegning" kun udarbejder et executive summary og ikke en standardiseret modelrapport)
3. "Modelabstract". Et 2 sideres abstract der meget kortfattet afgrænser indhold, substans og es-sens i et modelarbejde struktureret jf. modelprotokol (bør også indgå i modelrapport som et appendiks eller udarbejdes særskilt i forbindelse med overslagsmodelleringer, hvor der ikke udarbejdes en standardiseret modelrapport)
4. Modelarkivering. Indberetning af modelsetupfiler og dokumentationsmateriale til landsdækkende modeldatabase (www.metadatabase med abstracts, links mm.) fx på CD-rom eller lignende (bør indeholde en kombination af modeljournaler, præ- og postprocesserings dataanalyser, modeldatafiler, så modellen kan "regenereres" (køres igen på senere tidspunkt), eller indgå som grundlag for opdatering af DK-modellen (www.vandmodel.dk))

Punkt 3 og 4 beskrives nærmere i kapitel 15. Executive summary skal ikke nærmere beskrives her. Der er tale om et dokument som i forvejen udarbejdes i stort set alle projekter, hvor der indgår modeller, og der er ikke behov for at standardisere executive summary.

Der har i Danmark ikke været tradition for udarbejdelse af en standardiseret modelrapport og i mange projekter foreligger der slet ikke nogen egentlig modelrapport, men kun en præsentation af simuleringsresultater. Det vurderes imidlertid stærkt påkrævet at ændre på denne praksis i forbindelse med den modellering, der skal forekomme i de kommende år omkring detailkortlægning og zoner. Dels er der behov for, at resultaterne af forskellige modelarbejder bliver gjort mere gennemskuelige for en lang række interessenter, dvs. at samtlige trin i modelprotokollen beskrives efter en standardiseret disposition. Erfaringer i forbindelse med fx vandmiljørapportering viser således, at en standardiseret rapportering er en fordel for alle parter.

Modelrapporten skal klart kommunikere omfanget af den nuværende systemforståelse, kalibrerings- og valideringsresultatet, betydning af usikkerheder på input, parametre, processer og konceptuel model for simuleringsresultater og evt. forslag til videre arbejde. Resultater af eksterne reviews i forbindelse med konceptuel model, kalibrering, validering mm. bør også klart fremgå.

Modelrapportering (fx notater eller delrapporter) er påkrævede på forskellige trin under udvikling af den samlede model: efter konceptualisering, kalibrering og simulering, og også i forbindelse med senere forfining eller udbygning af modellen. Rapporterne ved disse milepæle giver mulighed for tekniske reviews og det er vigtigt, at modelrapporter beskriver begrænsninger i modellen, og påpeger mulige løsningsmetoder, som kan anvendes i efterfølgende dataindsamlingsprogrammer og i forbindelse med videreudvikling af analyser og model.

14.2 DISPOSITION FOR STANDARDISERET MODELRAPPORT

Modelrapporten skal indeholde følgende (Henriksen et al., 1998; Middlemis, 2000; Harrar og Henriksen, 1996; Laase et al., 2000):

Rapporttitel	Vælg en titel der klart og tydeligt kommunikere projektmål, formål, og resultater med modellen i stedet for en titel der blot afspejler at der er opstillet en model for et givent område. Titelblad bør udover en præcis titel indeholde tidspunkt for publicering (fx marts 2000), navn på rekvirent incl. specifik afdeling (evt. flere), navn på rådgivningsfirma/institution der udfører modelleringen (incl. navne på de personer der står bag modelarbejdet fra disse firmaer). Omfang 1 side.
Indholdsfortegnelse incl. særskilt figurliste, tabelliste og acronymliste	Indholdsfortegnelsen skal være standardiseret jf. punkter beskrevet nedenfor i denne tabel og skal indeholde en liste over bilag eller appendiks. Derudover bør der udarbejdes en selvstændig figurliste, tabelliste og en liste med acronymer (og benyttede forkortelser i rapporten). Min. 4 sider (start på ny side ved figur-, tabel- og acronymliste).
Kapitel 1. Executive summary	En opsummering af modelopstilling, vurderede management scenarier, og resultaterne af modelarbejdet. En kort beskrivelse af hvordan modellen er blevet udviklet og detaljeret. Sammenfatning vedr. usikkerheder og begrænsninger i modellen og forslag til fremtidig løsning af disse problemer (fx dataindsamling eller yderligere modeludvikling). Omfang ca. 1 side (evt. mere).
Kapitel 2. Introduktion	Beskrivelse af projektformål, modelformål, og krav til modelnøjagtighed i specifikke og kvantificerbare størrelser. Introduktion til modelområdet og tidligere undersøgelser i området, og beskrivelse af vandressource aspekter som der rettes særlig fokus på i området (hvilket trin i zonerings arbejdet der på, skal modellen give input til detailkortlægning eller benyttes til kvalitetssikring af indsamlede data og konklusioner. Hvis modellen benyttes i en af de senere faser, hvilke indsatsplaner og vandressourceproblemer er der for området). Omfang ca. 4 sider (incl. en figur der viser modelområdet).

<p>Kapitel 3. Teknisk "approach"</p>	<p>Her gives en beskrivelse af modelbenyttelsen og den metodik der er benyttet (incl. relevante referencer). Hvis der benyttes en integreret hydrologisk model beskrives forskellige input til denne fx klimadata, arealanvendelses- og vandindvindingsdata ligesom output beskrives. Hvilke dele af vandkredsløbet er inddraget og hvorfor? Hvilke koder er anvendt og hvorfor (strømningsmodel, partikelbanemodel og evt. stoftransportmodel)? Hvis der er inddraget parameter estimering (fx invers modellering), optimering, Monte Carlo metodik og evt. økonomiske risikoanalyser bør principperne bag hver enkelt af disse metoder incl. referencer beskrives og gør rede for, hvordan de anvendes som delelementer i det samlede modelarbejde. Er det valgt at arbejde med en enkelt konceptuel model eller er der benyttet alternative modeller? Omfang ca. 4 sider.</p>
<p>Kapitel 4. Dataanalyse, geologisk karakterisering, opstilling af hydrogeologisk tolkningsmodel</p> <p><i>(en del af dette kan med fordel ligge i appendiks eller udgøre en selvstændig datarapport)</i></p>	<p>Detaljeret information omkring den hydrogeologiske tolkningsmodel og tilhørende hydrauliske parametre for vandførende og lavpermeable lag incl. estimater af vandbalanceforhold. Kapitlet struktureres i følgende afsnit med stor vægt på visuel præsentation på figurer:</p> <p><u>4.1 Geologisk model:</u> (a) regional geologi, (b) stratigrafi for kvartæret, miocæne aflejringer og evt. ældre lag fx kalk, (c) specielle heterogenitetsforhold med vægt på sprækker og sandvinduer som følge af glacialtektoniske variabilitet og tektoniske forhold, forkastninger i kalk mm., (d) analyser på baggrund af detaljerede kortlægninger ved hjælp af overfladegeofysik, borehulslogging, seismik eller georadar. Præsentation på figurer af 3D geologisk model fx ved hjælp af geologiske profiler eller "fence diagrammer", tolkede geologiske laggrænsekort, udbredelse, top og bund af linser, prækvartæroverfladen, samt oversigts kort med datagrundlag/boringer mm.)</p> <p><u>4.2 Grundvandssystemet:</u> (a) Antagelser om reservoirforhold, heterogenitet og præsentation af valgt hydrostratigrafisk model. De enkelte lag i den hydrostratigrafiske model beskrives incl. antagelser om hydraulisk ledningsevne mm. Der udarbejdes tykkelseskort for de enkelte lag som præsenteres i rapporten. (b) Såfremt der er udarbejdet mere detaljerede konceptuelle model fx for de øverste morænelerslag beskrives disse i tekst og figurer.</p> <p><u>4.3 Hydrologiske afgrænsninger:</u> (ydre og indre randbetingelser). (a) Randbetingelser i form af modeloverflade, dræn og vandløb beskrives. (b) Ydre randbetingelser langs modelrand beskrives. (c) Fastlæggelse af modelbund (fx impermeabel bund).</p> <p><u>4.4 Hydrauliske størrelser:</u> (a) A-priori parameterværdi for hydraulisk ledningsevne intervaller (horisontal og vertikal) for de enkelte geologiske typer beskrives på baggrund af prøvepumpningsanalyser, slug-tests eller erfaringsværdier fra andre områder. (b) Magasinkoefficienter og -tal beskrives. (c) Lækagekoefficienter for fx vandudveksling mellem grundvand og vandløb/søer beskrives.</p> <p><u>4.5 Ind- og udstrømning/vandbalancen:</u> (a) Tidslig og rumlig variation i nedbør og fordampning indenfor modelområdet beskrives incl. datagrundlag og metoder. (b) Tidslig og rumlig variation i afstrømningsforhold indenfor modelområdet beskrives. (c) Beskrivelse af nettonedbørens variation i tid og rum og antagelser vedr. fordeling af nettonedbør mellem grundvand og overfladevand, evt. bypass-flow osv. (d) Øvrige "kilder" til grundvandsdannelse i området fx infiltrationsbassiner, nedsivning langs forsyningsledninger mm., (e) Vandind-</p>

	<p>vinding til vandforsyning, markvanding og industri i området. (f) Grundvandsafstrømning til vandløb (fx ud fra synkronmålinger) og anden interaktion mellem overfladevand og grundvand, (g) Grundvandspotentialerforhold og tidlige variationer i trykniveau ud fra pejle-tidsserier. Hvis vandspejl i overfladevand har relevans beskrives disse.(h) Vandbalance for modelområdet med samtlige input og output.</p> <p><u>4.6 Vandkvalitetsforhold:</u> (a) Beskriv naturlige vandkvalitetsforhold på udvalgte profilsnit, fx ved vandtype, redoxmiljø og nitratindhold eller i form af kort over de enkelte hydrostratigrafiske lag/grundvandsmagasiner</p> <p><u>4.7 Aldersdateringer:</u> Beskriv aldersbestemmelser ud fra tritium, CFC eller øvrige tracere i tabelform eller på profilsnit.</p> <p>Omfang: 20-40 sider heraf en stor del figurer og/eller tabeller.</p>
<p>Kapitel 5. Modelstudieplan</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Plan for håndtering af vandløb og søer, umættet zone, præferentiel strømning, densitetsforhold i modellen - Skitsering af afgrænsning af modelområde og diskretisering af mættet zone horisontalt og vertikalt - Forslag til simuleringsperiode og diskretisering i tid. - Plan for kalibrerings- og valideringsmetodik (nøjagtighedskrav) - Plan for usikkerheds- og sensitivitetsanalyser (herunder håndtering af usikkerhed på konceptuel model) - Tidsplan, milepæle og eksterne reviews - Begrundelse af valg af modelkode og præprocesser(-r) <p>Omfang 1-2 sider.</p>
<p>Kapitel 6. Modelopstilling</p>	<p>Beskrivelse af modelområde, diskretisering, hydrauliske parametre, input- og output til vandbalancen, randbetingelser og valg af kalibreringsmål/nøjagtighedskrav.</p> <p><u>6.1 Afgrænsning af modelområdet.</u> Beskriv UTM koordinater for modelområdet og diskretisering horisontalt og vertikalt af beregningslag.</p> <p><u>6.2 Randbetingelser.</u> Vis ydre randbetingelser på figur og beskriv valget. Beskriv hvilke indre randbetingelser der er anvendt og vist placering af dræn-, vandløb-, søer, hav mv. på kort, herunder en evt. a-priori distribuering af lækagekoefficienter for fx vandløb.</p> <p><u>6.3 Zonering af hydrauliske ledningsevner.</u> Begrund zoner på baggrund af geologi eller prøvepumpningsresultater og vis fordelinger på et kort af fx hydrauliske ledningsevner som distribueres over modelområdet. Præsenter konstante værdier i tabelform. Angiv et startgæt og en realistisk variationsramme for hver parameter i modellen, som forventes at skulle indgå i kalibreringen.</p> <p><u>6.4 Zonering af grundvandsdannelsen.</u> Præsenter den anvendte zonering af grundvandsdannelsen hvad enten denne er baseret på et eksternt modul eller er en del af den hydrologiske model i et antal grundvandsdannelsesklasser. Angiv et startgæt og realistiske variationsrammer for hver zone ud fra en analyse af datagrundlaget.</p> <p><u>6.5 Præsenter evt. alternative konceptuelle modeller,</u> såfremt det er valgt at arbejde med mere end en model.</p> <p><u>6.6 Numeriske parametre,</u> beskriv de benyttede konvergenskriterier, tidskridt og de øvrige numeriske parametre, der indgår i den benyttede kode/"solver"</p> <p>Omfang: 10-20 sider.</p>

<p>Kapitel 7 Kalibrering</p>	<p>Beskrivelse af kvantitative kalibreringsmål (targets), kvalitative mål og resultater af kalibrering og sensitivitetsanalyser</p> <p><u>7.1 Beskriv den anvendte kalibreringsmetodik og anvendte kvantitative og kvalitative kriterier.</u> Statistiske krav til residualafvigelse i forhold til trykniveau (fx RMS), flow (fx R^2) og kvalitative krav til vurdering i forhold til potentialebilleder, afstrømningshydrografer og fx vandkvalitetsdata. Brug af trial-and-error, invers metodik, sensitivitetsanalyser mm.</p> <p><u>7.2 Kalibreringsmål (targets).</u> Præsenter en liste med de targets (fx pejleboringer, vandføringsmålestationer) der anvendes til kalibrering og targets som planlægges benyttet til modelvalideringen. For hver udvalgt trykniveautarget angives trykniveau, der benyttes i forbindelse med stationær kalibrering, og vægtfaktor (synkronpejlinger vægtes mere end fx PC Jupiter data). Fluxtargets udvælges for delstrækninger ud fra synkronmålingsresultater og præsenteres ligeledes med en vægtfaktor. Derudover angives UTM koordinater, beregningslag (eller kote for filtermidtpunkt) for samtlige trykniveau- og fluxtargets i tabelform/bilag). Der præsenteres en figur der viser hvilke delstrækninger data er organiseret i forhold til (fluxtargets altså "reaches"). Targets der benyttes til transient kalibrering og evt. reserveres til validering beskrives med placering på kort og i tabelform.</p> <p><u>7.3 Kalibreringsjournal.</u> Der foretages en beskrivelse i tabelform af udvalgte kørsler hvor der er ændret væsentligt på den konceptuelle model eller modelopstilling, zonerings af parameterværdier o.l. Beskrives i tabelform med: Nr., Titel på kørsel, modelændring i forhold til tidligere version, kommentering af resultater i forhold til kalibreringsmål.</p> <p><u>7.4 Kalibreringsresultat.</u> Kalibreringsresultatet præsenteres i form af:</p> <ul style="list-style-type: none"> (a) vandbalance, incl. tidsserier for udvalgte komponenter og årlige massebalancer for model som helhed og enkelte modellag (b) massebalancefejl (numerisk løsning, konvergenskriterium) (c) præsentation af residualværdier af trykniveau og fluxer på kort, scatterplot og kalibreringsresultat i forhold til statistiske mål (fx RMS, R^2 o.l.) (d) sammenligning af simuleret og modelleret trykniveau (vises på kort, profiler, hydrografer og ved horisontale og vertikale gradienter) (e) sammenligning af simuleret og modelleret udveksling mellem grundvand og overfladevand (vandløbshydrografer, vandbalance-diagrammer mm.) <p><u>7.5 Resultater af sensitivitetsanalyser og invers modellering</u> Beskriv de kalibrerede parametre i tabelform. Angiv de mest følsomme parametre for anvendelse af modellen. Angiv hvilke parametre der evt. er foretaget invers kalibrering af og resultater heraf med hensyn til estimerede variationsintervaller, estimerede 95 % konfidensgrænser, resultater af korrelationsmatricer (korrelerede parametre) mm. Omfang: 20-40 sider (en stor del tabeller og figurer).</p>
<p>Kapitel 8. Modelvalidering</p>	<p>Angiv metoden og resultatet af modelvalideringen ud fra split-sample test, proxy-basin test eller differential split-sample test (evt. kombination af forskellige metoder).</p> <p><u>8.1 Valideringsmetode</u> (stationær og dynamisk model)</p> <p><u>8.2 Kvantitativ bedømmelse af valideringstesten</u> Præsenter statistiske</p>

	<p>kalibreringsmål for valideringsdatasættet sammenlignet med kalibreringsresultatet på baggrund af valideringstargets og residualværdianalyse.</p> <p><u>8.3 Semi-kvantitativ/kvalitativ vurdering af valideringen.</u> Præsenterer tidsserier for valideringsperioden af simuleret og målt vandføring og trykniveau, samt kort over simuleret og målt trykniveau med henblik på kvalitative vurderinger af valideringsresultatet.</p> <p><u>8.4 Alternative parametre.</u> Resultater af vandkvalitet, aldersdateringer og evt. forureningsspredning fra punktkilder sammenlignes med fx modelleret aldersfordeling og forureningsudbredelse beregnet med stoftransportmodel eller partikelbanemodel</p> <p><u>8.5 Sammenligning i forhold til tidligere modeller for området.</u> Hvis der foreligger andre modeller for området kan der evt. foretages en sammenligning af resultat, såfremt tidligere modeller er velkalibrerede og -validerede.</p> <p>Omfang: 5-10 sider.</p>
Kapitel 9. Begrænsninger i modellen	<p>Usikkerheder og svagheder i modellen i forhold til den konceptuelle model, diskretisering, erfaringer fra modelkalibrering, validering og simuleringer sammenfattes og forslag til løsninger beskrives med hensyn til såvel dataindsamling som fremtidig modeludvikling.</p> <p>Omfang 1-2 sider.</p>
Kapitel 10. Modelsimulering incl. usikkerhedsanalyser	<p>Resultater af de valgte simuleringsscenarier beskrives i forhold til valgt basis-case. Vurdering af usikkerheder på simuleringresultater.</p> <p><u>10.1 Præsentation af referencekørsel.</u> Trykniveau, afstrømningsforhold, nettonedbør, grundvandsdannelse til forskellige magasiner, grundvandsdannende oplande til vandværker og vandbalanceforhold præsenteres for basis case på kort og tidsserier. Præsentation af ændringer i øvrige simuleringsscenarier vises evt. i form af afvigelser fra basis-case fx ændret vandføring, afsækning mm.</p> <p><u>10.2 Fastlagte simuleringsscenarier.</u> Præsenteres i tabelform og på figurer. Processerede tidsserier til brug for scenarierne præsenteres (fx klima, oppumpning mm.).</p> <p><u>10.3 Resultater af simuleringsscenarier.</u> Grundvandsdannelsen præsenteres ud fra stationære og/eller transiente simuleringer i form af kumulative sandsynlighedsfordelinger for modelområdet som helhed eller kort der viser resultater for sandsynligheder på 0.1, 0.5 og 0.9, således at usikkerheder på input og parameterverdier indbygges i resultaterne. Partikelbaner beskrives dels deterministisk (best estimate) men der udarbejdes desuden plot af variationsrammer når usikkerhed på input og udvalgte parameterverdier inddrages.</p> <p>Omfang: 15-50 sider (meget afhængigt af opgavetypen).</p>
Kapitel 11. Konklusioner og anbefalinger	<p>Resultaterne af modelarbejdet sammenfattes. Anbefalinger vedr. management scenarier og andre resultater af modelarbejdet beskrives.</p> <p>Omfang: 1 side.</p>
Kapitel 12. Referencer	<p>Der udarbejdes en referenceliste med relevant litteratur.</p> <p>Omfang: 2 sider.</p>
Appendiks og bilag	<p>Så meget som muligt af den detaljerede information præsenteres i appendiks eller bilagsform, således at læsbarheden af rapporten er så god som muligt (ovenstående sideangivelser er incl. bilag).</p>

14.3 REFERENCER

- Harrar, W.G. og Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted å. Aquifer System: setup and calibration. Rekvirent Esbjerg kommune, forsyningsvirksomhederne og Ribe amtskommune. Marts 1996.
- Henriksen, H.J., Troldborg, L.T., Knudby, C.J., Dahl, M., Nygaard, P., Jakobsen, P.R. og Rasmussen, P. (1998) National Vandresource Model. Sjælland, Lolland, Falster og Møn. GEUS rapport 1998/109. www.vandmodel.dk
- Laase, A.D., Rumbaugh, J.O. and Anderman, E.A. (2000) Design, optimization and evaluation of the Kansas city plant interception system. Report prepared by Oak Ridge National Laboratory, Grand Junction, Colorado for Environmental Restoration Program at the Kansas City Plant, U.S. Department of Energy. Kansas City, Missouri. February 2000.
- Middlemis, H. (2000) Draft groundwater flow modelling guideline. Murray-Darling Basin Commission. Aquaterra Consulting Pty Ltd. Western Australia. Project No. 125. July 2000.

Kapitel 15 VEDLIGEHOJDELSE, OPDATERING OG UDBYGNING AF MODELLER. FORFINING AF MODEL

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Kvalitetsdokumentation, logbog, landsdækkende modeldatabase, modelsetup, rådata, vedligeholdelse af geologisk model, forfining af model, sub-model og regional/lokal model.

ABSTRACT: Vedligeholdelse, opdatering og udbygning af modeller forudsætter at rådata og processerede data håndteres på en veldokumenteret måde, så de på et senere tidspunkt kan "lukkes op" og anvendes evt. videreudbygges. Af hensyn til opbygning af landsdækkende modeldatabase bør setupfiler desuden indberettes til GEUS til metadatabase. Hvis man benytter GIS værktøjer eller fx GeoEditor eller anden geologisk modelværktøj til arbejdet med den geologiske model og opstilling af konceptuel model bør projekt-filer også gemmes. Der er forskellige muligheder for konvertering mellem forskellige præprocessorer (MIKE SHE/MODFLOW) og fx ArcView. En forfining af en model kan ske i de fleste præprocessorer, men vil oftest forudsætte indbygning af mere detaljerede data vedr. grundvandsdannelse, geologisk model, randbetingelser osv. En række elementer kan dog med fordel genbruges. Hvis man yderligere detaljerer en regional konceptuel model med nye felt-data, kan denne information godt efterfølgende indbygges i den regionale model, forudsat man er omhyggelig med evt. skalaproblemer. Derimod kan man ikke uden videre overføre de parameter-værdier fra den kalibrerede lokale model tilbage til den regionale model.

15.1 KVALITETSDOKUMENT, MODELRAPPORT OG DIGITAL KOPI AF FÆRDIGE SETUPFILER MM. TIL MODELDATABASEN (FX cd ROM)

Vedligeholdelse, opdatering og udbygning af modeller forudsætter at rådata og processerede data håndteres på en veldokumenteret måde, at modelsetup og de enkelte filer navngives på en logisk måde, og at datasæt og evt. modelsoftware (eller resultatfiler) gemmes så modellen på et senere tidspunkt kan "lukkes op igen" og anvendes, evt. videreudbygges. Det kan anbefales at føre en logbog over forløbet i modellering (en modeljournal som også kan bidrage til modelrapporten jf. kapitel 14).

Hvis modellen skal leveres med samtlige modelsetup filer (incl. geologisk og konceptuel model) til rekvirenten som en del af aftalen om modelarbejdet, kan det anbefales at videregive denne dokumentation på en eller anden form, så den findes på den CD-ROM der leveres til kunden. På Cd-rom'en bør al tilgængelig information om den benyttede modelkode, modelopstilling, modelrapport, modelabstract og executive summary være samlet, i form af pdf-filer.

Af hensyn til opbygning af en landsdækkende metadatabase for grundvandsmodeller bør denne CD-ROM desuden fremsendes til GEUS (Hydrologisk afdeling). Herved sikres det at oplysninger om grundvandsmodeller i Danmark kan samles på et sted. GEUS kan så på en passende hjemmeside udarbejde en oversigt over grundvandsmodeller incl. mulighed for download af pdf-fil af abstracts og evt. standardiseret modelrapport (pdf-format), samt oplysninger og links til kontaktpersoner hos rådgivningsfirmaer og rekvirent. Der er tale om en metadatabase, idet det er ideen at GEUS blot har mulighed for at gennemse de forskellige modelsetup udfra Cd-rommen, fx i forbindelse med opdatering af DK-modellen, hvorimod en egentlig udlevering af modelsetup fra databasen ikke påregnes (det vurderes at udveksling af modelsetup's bedre og mere direkte kan administreres af modelrekvirent evt. i samarbejde med modellør/rådgivende firma).

Ovenstående principper for den landsdækkende modeldatabase er ændrede i forhold til den nuværende database hos GEUS. Det nye forslag til procedure vil være omkostningsfrit for såvel amter som rådgiverne, idet GEUS's administration af den nye ordning er væsentlig lettere, idet udlevering af modelsetupfiler sker mellem amter og rådgivere.

15.2 MODELARKIV. HVILKE GRUNDDATA OG SETUPFILER BØR MAN GEMME DIGITALT, MED HENBLIK PÅ SENERE OPDATERING OG UDBYGNING AF MODEL?

Hvilke filer man bør gemme afhænger helt af den anvendte modelkode og præprocesser. For eksemplet Holsted-Sneum-Ribe å modellen fylder disse filer ca. 1 MB for en stationær model (modelsetupfilerne er her lagret i én databasefil). Præprocessoren (Groundwater Vistas i dette eksempel) genererer ud fra denne "modelsetupfil" de filer der benyttes i MODFLOW, MODPATH, UCODE, PEST osv. Ud fra modelsetupfilen er det desuden muligt at eksportere samtlige data til ASCII-filer eller ArcView filer, og man har derfor ikke behov for at gemme rådata (idet observationsdata/targets også er gemt i denne databasefil). Udover denne fil skal man dog huske at gemme de observationsdata fx tidsserier af afstrømning og pejlinger, eller pejleobservationer, som ikke indgår i kalibreringsgrundlaget, men som kan anvendes til fx validering af modellen. Derudover skal initialtrykniveaufil gemmes.

I MIKE SHE er det nødvendigt at gemme dels setupfiler (fsf-filer), gridfiler (T2-filer, specielt MIKE SHE format for griddede "fladefiler fx topografi, beregningslag, potentiale etc.), tidsserie filer (T0-filer, specielt MIKE SHE tidsserie filformat), vandløbssetup (rdf- eller et antal MIKE 11 filer), evt. hotstartfiler, forskellige dig-filer der fx indeholder observerede trykniveauer osv. Fsf-filen indeholder information om hvilke filer et givent modelsetup anvender, og man derfor skal huske at gemme. Udover de filer der fremgår af fsf-filen skal man ligeledes huske at gemme observationsdata fx tidsserier af afstrømning og pejlinger (t0-fil), og pejleobservationer (dig-fil).

15.3 OPDATERING OG UDBYGNING AF GEOLOGISK MODEL, KONCEPTUEL MODEL OG NUMERISK MODELOPSÆTNING

Det vil forudsætte en meget stringent modelleringsprocedure såfremt man udover modelsetupfiler derudover vælger at gemme rådatafiler, og det er formentligt vanskeligt at opnå en tilstrækkelig god dokumentation omkring processeringen af rådata til modelsetupdata, hvis der anvendes forskellige værktøjer der ikke selv kan holde styr på disse forhold. Hvis man benytter ArcView til arbejdet med rådata og konceptuel model og herfra importere data i MIKE SHE og MODFLOW, er det dog en god idé at gemme ArcView projektet (eller de 3 shapefiltyper: index, dbf og shape fil) der hører til et layout, idet man relativt let kan føre modellen tilbage til ArcView, og arbejde videre med den konceptuelle model, eller bruge et sådant værktøj til præsentation af resultater.

Hvis man anvender fx GeoEditoren der er en præprocesser der udgør et link mellem PC Jupiter og en hydrologisk model fx MIKE SHE, kan man anvende dette værktøj til vedligeholdelse af den geologiske model, og man skal derfor gemme projektet, så den kan genåbnes på et senere tidspunkt.

Endelig er der mulighed for at konvertere et MIKE SHE setup til MODFLOW, hvorved beregningslag og randbetingelser overføres. Oppumpninger, vandløb, dræn, nettonedbør mm. skal dog lægges ind fra "scratch" (MIKE SHE – MODFLOW converter). Til ArcView findes der extensions der kan udveksle t2-filer mellem MIKE SHE og ArcView (MIKE SHE converter), ligesom der findes en MODFLOW-converter der kan indlæse et MODFLOW setup til ArcView.

15.4 FORFINING AF MODEL (TOPOGRAFI, INDRE RANDBETINGELSER, AREALDATA, KONCEPTUEL MODEL MM.)

Såvel i MIKE SHE som MODFLOW har man mulighed for at generere en "sub-model" ud fra en eksisterende model (se kapitel 5). I MIKE SHE er geologisk model og beregningsgrid adskilte, og det er derfor overkommeligt at forfine modellen med flere beregningslag eller ændret maskevidde. Der kan dog være behov for redigering af indre randbetingelser hvis der tilføjes flere lag eller ændres på diskretiseringen. I MODFLOW kan man derudover forfine modelgriddet i et delområde.

En forfining af en model kan forudsætte opstilling af en mere detaljeret geologisk model, en revideret konceptuel model og kræve at stort set samtlige trin i modelprotokollen overvejes og/eller gennemarbejdes. Der er dermed tale om et helt nyt modelprojekt (gå venligst til kapitel 1 og start forfra). I nogen situationer kan ønsket om forfining af modellen dog udelukkende være begrundet af et ønske om at arbejde med et mere detaljeret modelgrid i et særligt interesseområde og i såfald kan man umiddelbart arbejde videre, blot med detaljeret grid, oppumpningsfordeling osv.

Der kan dog genbruges en række elementer, fx kan det være fordelagtigt at tage udgangspunkt i den konceptuelle model fra den regionale model, og så forfine eller detaljere de dele af modellen, hvor det er formålstjenligt. Man vil dog næsten altid være tvunget til at skifte topografien ud med en mere detaljeret topografi, og der skal derfor retolkes på eksisterende profiler og tilføjes nye profiler med henblik på tilvejebringelse af en detaljeret geologisk model.

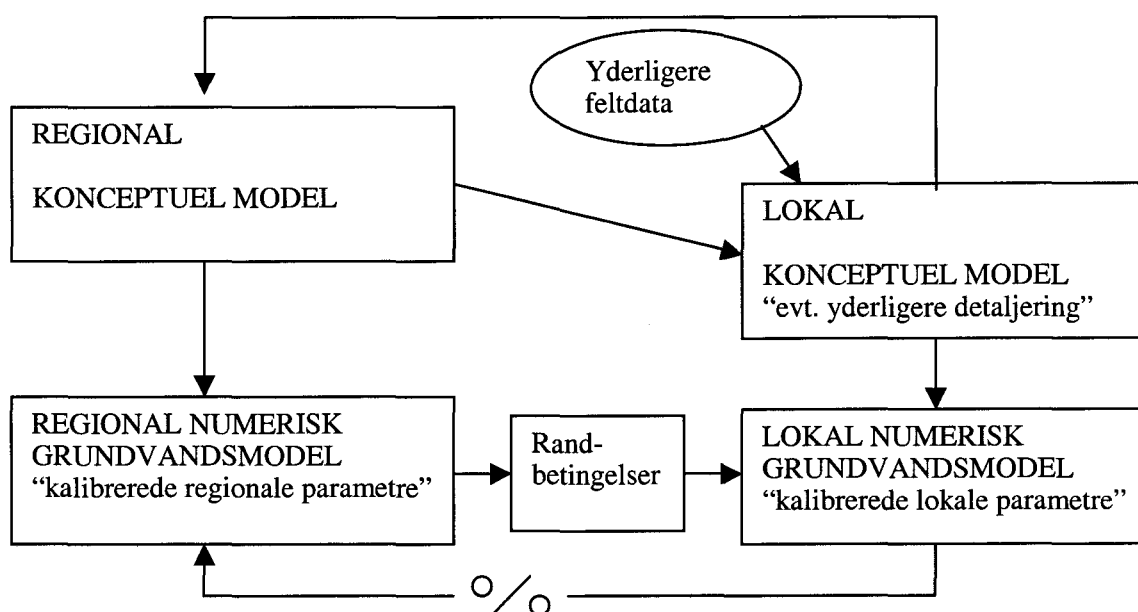
Man kan godt genbruge et eksisterende vandløbssetup (fx MIKE 11 filer). Men det kan være nødvendigt at medtage flere mindre vandløb, tilløb, grøfter mm.

Det er nødvendigt at lave en ny vurdering af grundvandsdannelsen, der er detaljeret yderligere.

15.5 REGIONAL MODEL – LOKAL MODEL

Når man går fra en regional model til en lokal model og i den forbindelse evt. indsamler supplerende geologiske og hydrogeologiske data med henblik på opstilling af en mere detaljeret model, hvilke spilleregler er så fornuftige at følge vedr. opdatering af den regionale model med ny viden ud fra den lokale model?

Dette spørgsmål har vi i dag nok desværre ikke et tilstrækkelig videngrundlag til at kunne besvare fuldt ud, og erfaringer fra modelarbejder i de kommende par år bør derfor opsamles på dette område, hvis der skal fastlægges klare spilleregler herfor. Jeg vil dog vove følgende "præliminære" spilleregler, som beskrevet i figur 15.1.



Figur 15.1 Spilleregler for opstilling af lokal model. Den regionale grundvandsmodel kan bidrage med randbetingelser til en lokal grundvandsmodel (fx fastholdt trykniveau, gradient, flow, grundvandsdannelse og evt. udveksling med dybere lag). Den regionale konceptuelle model kan være et værdifuldt input til den lokale konceptuelle model. Den lokale konceptuelle model kan evt. anvendes i forbindelse med en opdatering og revision af den regionale konceptuelle model. Derimod kan de kalibrerede lokale parametre ikke føres tilbage og bruges i den regionale numeriske grundvandsmodel.

15.6 REFERENCER

- Troldborg, L. og Henriksen, HJ (1999) National Water Resources Model of Denmark (DK-model) – Milestone results by applying a large scale MIKE SHE model for the isle of Sealand. DHI softwareconference 1999.
- Ullum, M., Nyegaard, P. og Henriksen, H.J. (2000) Grundvandsmodel for Svendborg området. Modelopsætning, kalibrering og tre scenarier. GEUS rapport nr. 2000/42.

Kapitel 16 MODELPROGRAMMER PÅ MARKEDET

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelkode (motor), grafisk brugerinterfaces (skaller), præ- og postprocessering, funktionalitet, numeriske algoritmer, analytisk model, public domæne og kodeverifikation,

ABSTRACT: På baggrund af den modelanvendelse der har været benyttet i de senere år i Danmark er det valgt primært at beskrive koder af MODFLOW familien samt MIKE SHE og de tilhørende grafiske bruger interfaces. Der er foretaget en sammenligning af forskellige modelkoder (motorer) med hensyn til type, udvikler, pris, indbyggede procesbeskrivelser (fx umættet zone) mm. Grafiske brugerinterfaces på markedet: Groundwater Vistas, MS-VMS, PMWin, Visual Modflow, GMS og MIKE SHE beskrives kortfattet i tabel mht. tilhørende koder, supporterede koder, mulighed for for-finede grid, autokalibrering, sensitivitetsanalyse, stokastisk simulering, præsentations- og udtræksmuligheder, nuværende udvikling, brugervenlighed, support mv.

16.1 VALG AF DE 3D MODELKODER (MOTORER) OG GRAFISKE BRUGER INTERFACES (SKALLER) DER INDGÅR I SAMMENLIGNINGEN

Modelkoder er computerprogrammer som indeholder algoritmer til numerisk løsning af ligninger for fysiske strømningsprocesser. De fleste modelkoder indeholder grafiske bruger interfaces til præ- og postprocessering af modeldata (se kapitel 5).

Modelkoden indeholder følgende:

- Funktionalitet mht. at importere data til beskrivelse af modelområdet og de hydrologiske påvirkninger i rum og tid
- Numeriske algoritmer der løser strømningsligningerne
- Funktionalitet mht. at udtrække resultatet af simuleringer

Den numeriske model giver mulighed for en beskrivelse af strømningsprocesser herunder kompleks geometri, dynamisk påvirkning af systemet og rumlig og tidlig variabilitet, og er derved mere generelt anvendelige end analytiske modeller (fx WinFlow og TwoDan). Analytiske eller semi-analytiske løsningsmetoder (fx "boundary integral method") skal derfor ikke omtales nærmere i nærværende kapitel, idet disse er mest velegnede til indledende trin eller overslagsberegninger, og ikke er så relevante til akvifer simuleringer (Hi fi), som typisk vil være behovet i forbindelse med zonerings.

Med henblik på facilitering af data input, strømningsmodellering og resultatbehandling, benytter de fleste modelkoder grafiske bruger interfaces (graphical user interface – GUI, på dansk: "skal"), baseret på fx Microsoft Windows. Procesovervejelser mm. i forbindelse med valg af kode er omtalt i kapitel 4 og 5. Formålet med dette afsnit er at sammenligne udvalgte koder som skønnes relevante i forhold til det danske marked. Der sker fortsat en betydelig udvikling og der henvises derfor til de enkelte udviklere og producenters hjemmesider, for mere ajourførte oplysninger. Her er dog givet en oversigtsmæssig sammenligning af udvalgte motorer og GUI's.

På baggrund af den modelanvendelse der har været benyttet i de senere år i Danmark har jeg valgt kun at beskrive følgende koder (motorer), se tabel 16.1:

- Modflow
- Modflow-Surfact
- ModflowT
- MIKE SHE

Og følgende grafiske bruger interfaces (skaller), se tabel 16.2:

- Groundwater Vistas (GV)
- Modflow-Surfact (MS-VMS)
- Processing Modflow (PMWin)
- Visual Modflow
- Groundwater Modeling System (GMS)
- Mike She

Herudover findes forskellige finite-element motorer: fx Aquifem-N, Aqua3D, Femwater, Sutra og Feflow. Femwater, SUTRA og FEFLOW giver mulighed for umættet zone beregninger og densitetsbetinget strømning. Nærmere oplysninger om SUTRA, AQUA3D, FEFLOW og Femwater kan fås på <http://www.scisoftware.com>. Priserne på disse koder ligger fra ca. 10.000 kr. op opefter. En del af koderne har deres egne interfaces, bortset fra Femwater som kan køres vha. GMS. I princippet giver FE koderne nogen fordele i form af mulighed for bedre tilpasset modelgrid / diskretisering fx tæt på indvindingsboringer og vandløb eller i forhold til geologi, men de er dog endnu ikke så udviklede, at de er i stand til at beskrive fx udvekslingen mellem grundvand og vandløb, med ligeså bredt et spektrum af forskellige procesantagelser eller randbetingelsestyper, som fx MODFLOW og MIKE SHE. Hvad de "vinder" i det mere fleksible beregningsnet, taber de til gengæld i det som det koster at administrere denne fleksibilitet. Der er derfor ikke den store forskel på "afviklingshastighed".

Det er almindeligt accepteret at Modflow oprindeligt udviklet af US Geological Survey (McDonald og Harbaugh, 1986), er en "industri-førende" grundvandsmodel, selvom den ikke nødvendigvis er egnet til enhver modelopgave. Der findes som nævnt i ovenstående liste en række forskellige GUI (skaller) til MODFLOW, som har forskellig funktionalitet og som konkurrerer om markedet både i USA, Europa og andre verdensdele. Public domain koder har normalt været udsat for omfattende peer-reviews, med dokumentation af deres generelle anvendelighed på en række case-studier, så vel som deres evt. begrænsninger, hvilket i betydeligt omfang er publiceret i den videnskabelige litteratur.

Mange af public domain koder blev oprindeligt udviklet af (og raffineres fortsat af) US government agencies (fx USGS, EPA og Department of Defence), med betydelig assistance af specialist konsulenter (Modflow blev oprindeligt udviklet i 1986 af USGS og er efterfølgende blevet opgraderet mere gennemgribende to gange dels i 1996 og igen i august 2000).

Private koder er dem som udvikles af bestemte firmaer, og selvom de kan have mange attributter fælles med public domain koder, så er kildeteksten ikke tilgængelig for disse koder, og anskaffelsesprisen er normalt meget dyrere i forhold til public domain koderne. De private koder sælges som færdige produkter med tilhørende service. Omfanget af peer reviews af koden ofte er begrænset! Modflow Surfact, ModflowT og Mike She er eksempler på "private modelkoder".

Den primære årsag til at Modflow generelt har et godt omdømme indenfor grundvandsmodellering er at koden er anvendt som referencemodel ved amerikanske domstole, er blevet verificeret i forhold til en bred vifte af analytiske løsninger, koden har været anvendt til at simulere et meget stort antal hydrogeologiske systemer over hele verden, kildeteksten er public domain kode og der findes adskillige relativt billige og udmærkede skaller til Modflow (GUIs). En anden styrke ved Modflow og en række af de øvrige koder er at de er blevet udviklet med en modulær opbygning (moduler der beskriver forskellige hydrologiske processer kan slås fra og til), og nye moduler til beskrivelse af strømningsprocesser eller forbedrede numeriske metoder bliver løbende produceret og integreret til Modflow, og visse af de øvrige koder. De private koder er ikke verificeret i samme grad som følge af et stort antal case eksempler eller artikler i internationale tidsskrifter som MODFLOW.

Der findes en forskellige Modflow versioner (se <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware>):

- MODFLOW88
- MODFLOW96
- MODFLOWP
- MODFLOW2000

Og desuden en række private koder:

- GeoTrans: MODFLOWT (www.hsigeotrans.com)
- HydroGeoLogic: MODFLOW-SURFACT (www.hgl.com)
- Environmental Simulation Inc.: MODFLOW^{win32} (www.groundwatermodels.com)
- DHI, Institut for Vand og Miljø: MIKE SHE
(<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Description/index.htm>)

Tabel 16.1 Sammenligning af 3D grundvandsmodeller

	MIKE SHE	Modflow	Modflow Surfact	ModflowT
Type	3D flow og stoftransport	3D flow (stoftransport Moc3D, MT3D eller MODPATH)	3D flow og stoftransport	3D flow og stoftransport
Udvikler / support	DHI, Institut for Vand og Miljø, Danmark	USGS, USA	HydroGeoLogic, USA	Hydrosolve/HsiGeotrans, USA
Pris	Sælges med interfaces (se GUI tabel 16.2)	Public domain	2,600 US \$ (Modflow-Surface99)	500 US \$
Udveksling mellem grundvand og vandløb	Flere muligheder, bl.a. kobling til MIKE 11. Dokumentation i forhold til testcases er begrænset.	Flere muligheder. Veldokumenteret i litteratur. Der findes forskellige grader af detaljering /packages.	Flere muligheder.	Flere muligheder.
Umættet zone	Ja (fuld kobling, både Richards ligning og simple beskivelse)	Nej	Ja (Richards ligning)	Nej
Densitetsbetinget strømning	Under udvikling, HST3D er indbygget, men test cases mangelfulde.	Under udvikling	Under udvikling	Nej
GUI (se tabel 16.2)	MIKE SHE (en ny forbedret objekt orienteret Windows GUI under udvikling)	PMWin, Groundwater Vistas, Visual Modflow og GMS	Groundwater Vistas (kompatibel med PMWin, Visual Modflow og GMS)	Groundwater Vistas (Kompatibel med PMWin, Visual Modflow og GMS)
Kommentar	Veludbygget funktionalitet som integreret hydrologisk modelværktøj og dynamisk kredsløbsmodel (flow og transport). Koblinger både programmets styrke og svagt punkt. Unik vandresourcekode testet på DK-model.	Førende industristandard på verdensplan som grundvandsmodel. Udviklingen går dog relativt langsomt med "knubskydninger" i en række private koder. MODFLOW-2000 nyeste standard, releaset i august 2000.	Indeholder speciel Newton Raphson solver, mættet/umættet strømning og stoftransport og multifasetransport af flygtige stoffer. Surface-99 kompatibel med bla. Groundwater Vistas, GMS 2.1, PMWIN. Surface-2000 på vej.	Koden er primært en "forbedret" stoftransportmodel.

Tabel 16.2 Grafiske bruger interfaces til Modflow og Mike She

Navn på GUI:	Groundwater Vistas	Modflow Surfact	Processing Modflow	Visual Modflow	Groundwater Modeling System	Système Hydrologique Européen
Forkortelse	GV	MS-VMS	PMWin	VM	GMS	MIKE SHE
Ca. pris		1.400 US \$	2.000 US \$	0 US \$	3.000 US \$	16.000 US \$ incl. GUI, dedikeret version: ca. 5.000 US \$)
Udvikler	Environmental Simulation International (ESI)	HydroGeoLogic (HGL)	Chiang & Kinzelbach	Waterloo Hydrogeologic	U.S. Army Corps of Engineers	DHI, Institut for Vand og Miljø
Umættet zone	Ja, med Modflow Surfact fra HGL (2,600 US \$)	Ja, Richards ligning	Nej	Nej	Nej	Ja, Richards ligning + forenklet løsning
Densitetsstrømning	Under udvikling	Under udvikling	PMWin densitetsmodul	Nej	Nej	Ja, HST3D indbygget i 2000 (case studie test mangler)
Sprækkestrømning	Nej	Ja	Nej	Nej	Nej	Ja (makropore)
Stoftransport og partikelbane	MT3D, RT3D og MODPATH	MT3D og MODPATH	MT3D, MT3DMS, MOC3D og PMPATH99	MT3D og Modpath	MT3D, Modpath, RT3D og SEAM3D	MIKE SHE stoftransport modul og partikelbanemodul
Supporterer desuden	MT3DMS, MOC3D, PATH3D, MODFLOWT og Modflow-Surfact.	MT3DMS, RT3D, MOC3D, PATH3D		MT3DMS, MT3D99 og RT3D		
Teleskop grid refinement (Sub-model)	Ja	Ja	Ja	Nej	Under udvikling	Ja
On screen views	Plan + tværprofil	Plan + tværprofil	Plan i flow,	Plan + tværprofil	Plan + tværprofil Desuden fence + 3D visualisering	Plan: 2D editor og river editor
Autokalibrering	UCODE, Pest (lite) Supportere PEST	UCODE, Supportere PEST	UCODE Pest (lite)	Supporterer WinPEST	NEW PEST og UTCHEM	Under udvikling. MIKE SHE/UCODE (GEUS DK-model)

Table 16.2 (continued)	GV	MS-VMS	PMWin	VM	GMS	MIKE SHE
Sensitivitetsanalyse	Automatiseret	Automatiseret	Nej	Nej	Nej	Under udvikling
Indbygget stokastisk simulering	Ja, Monte Carlo metodik til Modflow, MT3D og Modpath	Nej	Nej	Nej	Nej	Nej
Præsentations- og udtræksmuligheder	Import + Eksport til surfergrid og datafiler. God Arc View shapefile wizard til import og eksport. Import fra EVS og Earthvision. TECHPLOT	Import + Eksport til surfergrid og datafiler. Eksport TECHPLOT 3D visualisering.	Import fra surfer Eksport til surfer, 2D visualisering.	Import og eksport til Surfer grid. Eksport ArcView format. Indbygget 3D animation med Visual Groundwater.	Import og eksport til Arc View, Arc Info mm. Indeholder geostatistisk funktionalitet til 3D interpolation, kriging mm.	Import og eksport i tekstfilformat (t0 og t2 filer). Konverter/extension til ArcView.
Nuværende udvikling	Udvikling i gang. Forventes at supportere MODFLOW-2000 og PEST-2000 i løbet af efteråret. Udvikling i gang omkring optimeringsværktøjer	Udvikling i gang mht. overfladevandsgrundvandsmodellering. Modflow Surface 2000 forventes at integrere 3D UZ med 3D grundvand og kanalstrømning og sprækkestrømning. GV vil ikke supportere Surface-2000 version.	Udvikling i gang mht. til inkorporering af MODBRANCH stream interaction package	Udvikling følger måske lidt efter øvrige GUI's men menu-system er enkelt og brugervenligt.	Udvikling i gang omkring nye interfaces til PEST og UTCHEM.	Udvikling i gang mht. ny MIKE ZERO windows interface. Forbedret stationær løser og simpel MIKE 11 routing under udvikling. Nye moduler: Geoeditor, UZ editor, HST3D og FE grundvand.
Kommentarer	God hjælp og support. Fuld support af nye release Modflow packages. God og billig kode. Velstruktureret. Udvikles af konsulentfirma i USA/UK. Standard i UK (EA)	Udvikler er et større konsulentfirma i USA. God stoftransportmodel. Ny version på vej der kan blive en konkurrent til MIKE SHE på kredsløbsområdet.	Udvikler er underviser ved Inst. For Groundwater studies ved University of Free State og aktiv i udvikling og publicering af en række grundvandssoftware	Udvikles af Canadisk konsulentfirma. God kode for begyndere og uerfarne modellerører (logiske og selvforklarende menuer)	Gode faciliteter til interpolation af geologisk model og geostatistik.	Unik vandressource model og dynamisk kredsløbsmodel. God 2D editor og MIKE 11 interface. Import/eksport lidt mangelfuldt eller besværlig i MIKE SHE.

Kapitel 17 KVALITETSSIKRING I FORBINDELSE MED MODELOPGAVER

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelprotokol, udbudsbetingelser, milepæle, reviews, kvalitetssikring

17.1 INDLEDNING

Offentlige myndigheder bruger ofte eksterne rådgivere til at gennemføre modelleringsopgaver. Mange rådgivende ingeniørfirmaer har opbygget faglige grupper, der som hovedopgave beskæftiger sig med modellering. Disse modelgrupper har mulighed for at opnå en højere grad af specialisering og erfaring end det i praksis er muligt at opnå i fx en amtslig vandressourceforvaltning. For at sikre en nødvendig faglig udvikling og kvalitet samt kontinuitet i forbindelse med jobskift er det endvidere nødvendigt at have en gruppe på minimum 3-5 personer, som beskæftiger sig fuld tid med modellering. En sådan "kritisk masse" kan nemmere opnås i nogle få rådgivende firmaer end i amtslige vandressourceforvaltninger. Derfor er der også som regel god rationale for offentlige myndigheder i at benytte eksterne specialiserede rådgivere til modelleringsopgaver.

Når en organisation skal have hjælp fra en ekstern rådgiver til at gennemføre en større modelleringsopgave er der dog flere forhold, der under uheldige omstændigheder kan bidrage til at udbyttet af rådgiverindsatsen bliver mindre end ønskeligt. Eksempler herpå er:

- Såfremt rådgiveren ikke forstår vandressourceforvalterens behov og derfor tilbyder/gennemfører aktiviteter som ikke er optimale i forhold til de virkelige behov.
- Såfremt vandressourceforvalteren ikke forstår, hvad det er muligt at opnå med brug af modellering, og derfor ikke kan stille de rigtige konkrete krav til opgaveløsningen.
- Såfremt vandressourceforvalteren ikke er i stand til fagligt at vurdere om rådgiverens resultater er fagligt acceptable.

Erfaringerne fra de sidste års modelleringsarbejde i amterne viser, at der er adskillige eksempler på frustrationer mellem vandressourceforvaltere og rådgivere. Det drejer sig dels om, at vandressourceforvalteren ikke altid oplever, at han får leveret den ydelse han har bestilt og betalt for, og dels at rådgiveren ikke altid oplever, at forvalteren accepterer opgaveløsningen, efter at rådgiveren har lavet arbejdet i henhold til de givne specifikationer. Der findes også eksempler på at forskellige rådgivere er nået frem til vidt forskellige svar, fx på grundvandsdannelsens størrelse i et givet område, på baggrund af det samme datagrundlag. Der er således brug for en øget kvalitet såvel i selve modelleringsarbejdet som i samspillet mellem rådgiver og forvalter.

En faktor som givet vis har forstærket problemet er tendensen inden for de seneste år til i højere grad at udbyde en opgave i (pris)konkurrence mellem flere rådgivere. Såfremt udbudsbetingelserne ikke er præcise, men fx blot taler om at "opstille en model" uden eksempelvis at specificere nogen form for forventet nøjagtighed er det fristende for rådgiveren at lave et billigt tilbud, vel vidende at han sandsynligvis ikke ville få opgaven såfremt han byggede for meget dyr kvalitet ind i den foreslåede løsning. Det betyder ikke at konkurrence er en dårlig ide. Det kan i mange situationer være

en glimrende ide, men det stiller store krav til udbudsmaterialet, såfremt man vil have fuld valuta for pengene.

I dette kapitel gives et forslag til nogle mekanismer som i mange tilfælde kan forøge kvaliteten af det gennemførte modelleringsarbejde.

17.2 MEKANISMER TIL AT OPNÅ BEDRE KVALITET I MODELLERING

Den vigtigste forudsætning for at opnå bedre kvalitet og større gensidig tilfredshed er at have en mere præcis og hyppigere dialog mellem forvalteren og rådgiveren. Til dette formål kan der med fordel tages udgangspunkt i modelprotokollen (Fig. 0.2). Det er ikke nødvendigvis alle trin i protokollen, som skal benyttes hver gang, der gennemføres en modelleringsopgave, men protokollen bør benyttes som en tjekliste, og som regel vil langt de fleste trin indrages.

Det vigtigste dokument i forbindelse med en modelleringsopgave er udbudsbetingelserne. Det gælder både for opgaver, som udføres i egen organisation, og for opgaver, som løses af eksterne rådgivere. Udbudsbetingelserne bør være så præcise som muligt. Ideelt ses bør der fx specificeres hvilken nøjagtighed slutmodellen skal have. Det kan dog kun lade sig gøre, hvis der er tidligere og lignende modelstudier i samme område. I praksis kan man ikke forudsige alt i detaljer i udbudsbetingelserne, og forvalterens ønsker til nøjagtighed vil fx ofte afhænge af de tilhørende omkostninger. Derfor er det vigtigt at faseindele opgaven, så der løbende opnås enighed om detaljerne for de(n) næste fase(r).

I det følgende er angivet forslag til en faseopdelt procedure, der sikrer at projektet naturligt kommer gennem nogle kvalitetssikringsprocedurer, samt at rådgiver og forvalter regelmæssigt kontrollerer, at de er enige om projektplanerne og om projektet holder sig "på sporet".

Endelig anbefales en mere standardiseret rapportering af modelarbejder med en bedre dokumentation af de vigtigste trin i forbindelse med et modelprojekt. Der har i Danmark ikke været tradition for udarbejdelse af en standardiseret modelrapport og i mange projekter foreligger der slet ikke nogen egentlig modelrapport, men kun en præsentation af simuleringresultater. Det vurderes imidlertid stærkt påkrævet at ændre på denne praksis (eller mangel på samme) i forbindelse med den modellering der skal forekomme i de kommende år omkring detailkortlægning og zoner. Dels er der behov for at resultaterne af forskellige modelarbejder bliver gjort mere gennemskuelige for en lang række interessenter, dvs. at samtlige trin i modelprotokollen beskrives efter en standardiseret disposition. Erfaringer i forbindelse med fx vandmiljørapportering viser således at en standardiseret rapportering er en fordel for alle parter.

Modelrapporten skal klart kommunikere omfanget af den nuværende systemforståelse, kalibrerings- og valideringsresultatet, betydning af usikkerheder på input, parametre, processer og konceptuel model for simuleringresultater og evt. forslag til videre arbejde. Resultater af eksterne reviews i forbindelse med konceptuel model, kalibrering, validering mm. bør også klart fremgå.

17.2.1 Udbudsbetingelser

Vigtige elementer i udbudsbetingelser er:

- Beskrivelse af opgavens målsætning
- Beskrivelse af ønsker til nøjagtighed
- Beskrivelse af ønsker til kalibrerings- og valideringsgrundlag
- Krav om at tilbuddet indeholder beskrivelser af de forskellige trin i protokollen
- Beskrivelser af hvordan opgaven faseinddeles med angivelse af milepæle, hvor der skal gennemføres et review af de foreløbige resultater, og hvor der opnås enighed om detaljer til indholdet i næste fase.
- Krav til rapportering.

17.2.2 Milepæle

Der er fire tidspunkter i et opgaveforløb, hvor det ofte kan være fornuftigt at indlægge milepæle og lave status. Det drejer sig om:

Milepæl 1: Review af hydrogeologisk tolkningsmodel

Her skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende:

- Godkendelse af den hydrogeologiske tolkningsmodel
- Forslag til hvilken modelkode der skal anvendes
- Forslag til hvilke data der skal benyttes i model opsætningen, herunder eventuelt behov for yderligere felldata
- Foreløbige angivelser af nøjagtighedskrav i modelleringen

Milepæl 2: Review af modelopsætning og nøjagtighedskrav

Efter at modellen er sat op og der typisk er gennemført en enkelt modelkørsel skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende:

- Godkendelse af model opsætningen
- Godkendelse af nøjagtighedskrav i modelleringen
- Forslag til kalibreringsprocedure
- Forslag til valideringsprocedure
- Forslag til usikkerhedsanalyser

Milepæl 3: Review af kalibrering og validering

Her skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende:

- Godkendelse af model kalibreringen
- Godkendelse af modelvalideringen
- Forslag til modelsimuleringer til praktisk anvendelse
- Forslag til overdragelse af projektresultater (slutrapport, modeldata, mv.)

Milepæl 4: Review af modelsimuleringer og usikkerhedsanalyser

Her skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende:

- Godkendelse af de afsluttende modelsimuleringer
- Godkendelse af usikkerhedsanalyser
- Godkendelse af overdragelsen af projektresultaterne til slutbrugeren

De vigtigste af de fire milepæle er ofte milepæl 1 og 3.

17.2.3 Gennemførelse af reviews

Det er vigtigt at reviews i forbindelse med milepælene formaliseres. Oplæggene fra rådgiveren i forbindelse med de forskellige milepæle kan med fordel formuleres som udkast til de forskellige kapitler i modelrapporten (jf. afsnit 14.4). Som et minimum bør oplæggene fra rådgiveren være skriftlige, og der bør laves beslutningsreferater fra de afsluttende møder. I mange tilfælde kan det være en god ide at indrage eksterne personer som reviewere. Det gælder især ved vurderingen af kvaliteten af modelleringsarbejdet. Det kan fx ske ved, at forvalteren har en "husrådgiver" som bisidder.

Middlemis (2000) skelner mellem følgende typer reviews:

- *Model appraisal*, dvs. en gennemgang af modelrapporten af en fagperson, som ikke nødvendigvis er modellør.
- *Peer review*, dvs. et review gennemført af "ligemænd" hvilket vil sige af uafhængige modellører.

- *Model audit*, som udover en gennemgang af en modelrapport omfatter en audit også en gennemgang af samtlige modelsetupfiler, simuleringer og output af en erfaren modellør.
- *Post audit*, dvs. en vurdering af tidligere prediktioner på et tidspunkt, hvor der er fremskaffet flere data, fx nogle år senere.

En appraisal er mindre modelteknisk end et peer review, som omvendt ikke er lige så omfattende som en modelaudit. I Middlemis (2000) er der udarbejdet tjeklister for model appraisal og peer review, incl. score-lister der beskriver modellens samlede performance.

Tabel 17.1 giver en anbefaling af hvilke typer reviews, der kan være brug for i forskellige situationer.

17.3 OMKOSTNINGER VED KVALITETSSIKRING

På kort sigt er der selvfølgelig omkostninger forbundet med at lave kvalitetssikringsprocedurer som beskrevet ovenfor. Inddragelse af en husrådgiver som bisidder koster måske 5% ekstra i forhold til selve rådgiverkontrakten. Samtidig vil det formelle system med milepæle med tilhørende rapportering og møder koste nogle ressourcer. Endelig vil et kvalitetsløft med mere omhu (mere intern kvalitetcheck hos rådgiveren) og yderligere aktiviteter som fx systematiske usikkerhedsvurderinger koste nogle ekstra ressourcer. Efter vores skøn vil en modelleringsopgave typisk blive 10-50% dyrere, hvis ovenstående forslag følges. Til gengæld er vi af den klare overbevisning, at resultaterne bliver meget mere troværdige og værdifulde, og at pengene derfor på lidt længere sigt er givet særdeles godt ud. Når modellering bruges som grundlag for udarbejdelse af indsatsplaner ved grundvandszoner med tilhørende muligheder for ekspropriative indgreb, er en formel kvalitetssikringsprocedure på linie med ovenstående en absolut forudsætning.

17.4 REFERENCER

Middlemis, Hugh (2000) Draft groundwater flow modelling guideline. Murray-Darling Basin Commission. Aquaterra consulting Pty Ltd. Western Australia. Project No. 125. July 2000.

Tabel 17.1 Behov for forskellige typer af review i forskellige situationer

	Screening	Overslagsberegninger	Detailberegninger ("Hi fi")	
			Planlægningsstudie/lavrisiko	Grundlag for ekspropriation/højrisiko
Milepæl 1 Hydrogeologisk tolkningsmodel	Model appraisal af samlet opgave	Model appraisal	Peer review	Peer review
Milepæl 2 Modelopsætning og nøjagtighedskrav		Intet	Peer review	Peer review
Milepæl 3 Kalibrering og validering		Peer review	Peer review	Model audit
Milepæl 4 Modelsimuleringer		Intet	Peer review	Model audit



ESBJERG MODELLEN – ET EKSEMPEL

Bill Harrar, Hans Jørgen Henriksen og Torben Obel Sonnenborg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Formål, geologisk model, hydrogeologiske tolkningsmodel, valg af modelkode, modelopsætning, kalibrering, simuleringer

ABSTRACT: Esbjerg modellen er et eksempel på et modelarbejde udført i forbindelse med lokalisering af fremtidige kildepladser for Esbjerg Vandforsyning. Arbejdet har omfattet opstilling af geologisk model og konceptuel hydrogeologisk model. Opstilling af beregningsscenarier og simuleringer. Rapportering i form af rapport over simuleringresultater og modelrapport. Der er anvendt en MODFLOW numerisk grundvandsmodel og gennemført vurderinger af vandløbspåvirkning og afsenkning af trykniveau som følge af etablering af fremtidig indvinding samt partikelbanesimulering af indvindingsoplande.

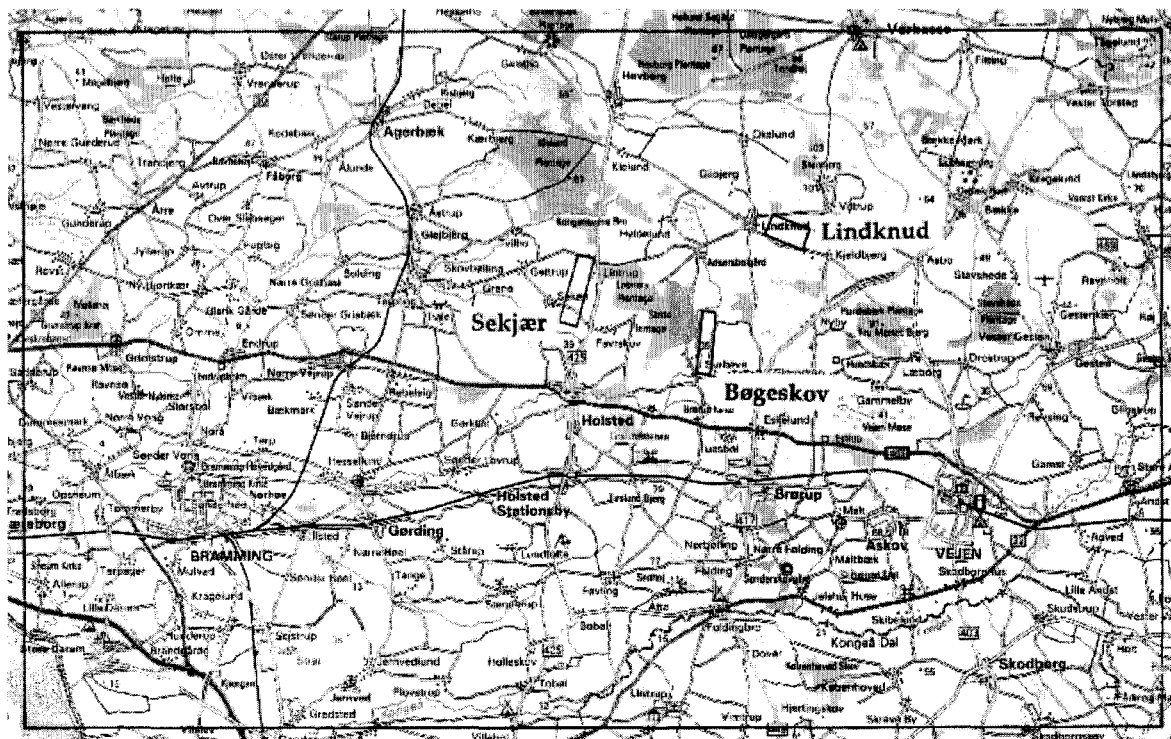
A.1 FORMÅLET MED OPSTILLING AF MODEL

Det overordnede formål for opstilling af en grundvandsstrømningsmodel var at beskrive de hydrogeologiske forhold og regionale strømningsforhold i grundvandet for oplandet til Sneum – Bramming – Holsted å, i den sydlige del af Ribe Amt (se figur 1) med henblik på at vurdere grundvandsressourcens størrelse og regionale fordeling samt de hydrogeologiske følgevirkninger på grundvandstand og vandløbsafstrømning, som følge af forøget vandindvinding i området (Henriksen et al, 1995; Harrar og Henriksen, 1996).

Mere specifikt var formålene med opstilling af grundvandsmodellen:

- (1) At opstille en geologisk model for området
- (2) At afprøve opstillede hypoteser (konceptuelle model) for den overordnede regionale grundvandsstrømning i området
- (3) At udvikle en fleksibel grundvandsmodel, som er let at opdatere og generelt anvendelig til regional modellering i området
- (4) At belyse kalibreringsresultatet, herunder data og parametre, som har størst betydning for de opnåede resultater
- (5) At gennemføre modelsimuleringer med henblik på design af kildepladser, herunder konsekvensberegninger ved etablering af nye indvindinger (påvirkning af grundvandspejl, påvirkning af vandløbsafstrømning og påvirkning af indvindingsoplande til nuværende og fremtidige kildepladser)
- (6) At give input til fortsat dataindsamling og monitorering i forbindelse med supplerende undersøgelser, detailprojektering, indkøring og drift af nye kildepladser

Det overordnede mål med projektet har været at identificere og karakterisere en ny potentiel grundvandsressourcer til Esbjerg by i Ribe Amt. Ressourcen skal være beliggende indenfor Ribe Amt, og have en total kapacitet på adskillige million m³ pr. år, og producere drikkevand af god kvalitet.



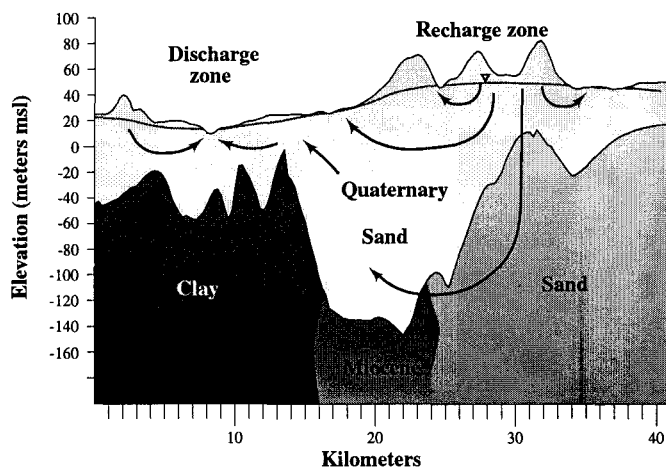
Figur 1 Modelområde for Esbjergmodellen. De indlagte rektangler angiver potentiel placering af nye kildepladser.

A.2 GEOLOGISK MODEL

En grundvandsmodel for Sneum å–Holsted/Bramming å i den sydlige del af Ribe Amt er blevet udarbejdet med henblik på at vurdere grundvandsressourcens størrelse og regionale fordeling samt følger af vandindvinding i området (Henriksen et al., 1995). En geologisk model som grundlag for den hydrogeologiske model blev opstillet. Basisdata omfattede eksisterende borer fra GEUS Jupiter boringsdatabase suppleret op med 15 nye borer, oplysninger fra den geologiske kortlægning i området samt geofysiske data og kortlægninger i form af borehulslogs i de nye borer, gravemetri, elektromagnetiske sonderinger og seismik. Der blev fremstillet 18 regionale geologiske profiler samt 6 detaljerede geologiske profiler. Prækvartæroverfladens højdeforhold og fordelingen af de miocæne formationer ved overfladen blev kortlagt.

Profiler og beskrivelser af sedimenterne blev anvendt til at estimere parametre (f.eks. hydraulisk ledningsevne), og især relationerne mellem lerlag og sandlag samt kontakten mellem de kvartære og miocæne aflejringer og deres betydning for magasinforholdene blev vurderet. En vigtig og central del af den geologiske model var at beskrive en dominerende Kvartær erosionsdal, som er mere end 200 meter dyb (figur 2). I dalen findes tre smeltevandssandmagasiner adskilt af lav-permeable lerlag. I de miocæne aflejringer blev den vandførende Ribe Formation kortlagt samt den lidt mindre vandførende Odderup Formation.

På grundlag af profilerne og forekomsten af lavpermeable lag blev der fremstillet overfladekort for 20 meters intervaller (slicede kort). Data blev brugt som overordnet ramme for parameterfastsættelse i modellens lag og grids for henholdsvis vandførende og lavpermeable lag.



Figur 2 Geologisk snit (vest-øst) gennem modelområdet.

A.3 KONCEPTUEL HYDROGEOLOGISK MODEL

Den konceptuelle model af de hydrogeologiske forhold i undersøgelsesområdet blev udviklet baseret på en syntese af geologiske, hydrologiske og klimatiske data. Den konceptuelle model blev udviklet med henblik på at guide modelopstilling, fastlæggelse af variationsrammer for parametre og inputdata, fastlæggelse af initiale parameter estimater (a-priori værdier), og tilvejebringe en ramme indenfor hvilken ændringer blev foretaget under modelkalibreringen.

A.3.1 Hydrologiske processer

Den topografiske variation er vigtig for den rumlige fordeling af nedbøren i modelområdet. Korrikeret nedbør varierer mellem 870 mm/år og 1200 mm/år. Baseret på årlig nedbør ved målestationerne blev der beregnet en gennemsnitlig nedbør for perioden 1985-94, idet huller i dataserier blev udfyldt ved korrelation til nærliggende stationer, og data blev korrikeret for vind- og befugtnings-tab ud fra lækategorier for hver enkelt station (evt. vægtet, hvis stationer var flyttet indenfor perioden). Herved blev der udarbejdet et plankort med estimeret nedbør ved 60 stationer indenfor området.

I den vestlige del af modelområdet varierer nedbøren mellem 1000-1050 mm/år. I den centrale del, hvor topografien er over kote +40 m, varierer nedbøren mellem 1100 og 1200 mm/år. I de større vandløbsdale i den sydlige del af området (ved Kongeåen og øst for Vejen) er nedbøren på 900 til 1000 mm/år. Nedbøren varierer primært som følge af topografiske effekter og placering af skovområder (nord for Holsted), som vurderes at medføre forøget nedbør lokalt i området. I den østlige del af området vurderes nedbøren at være reduceret på grund af "skyggevirkning" fra de højtliggende områder mod vest. I gennemsnit er nedbøren 950 mm/år for området.

Den potentielle fordampning varierer mellem 500 og 600 mm/år i området (Hovborg), med en gennemsnitsværdi på 550 mm/år for perioden 1965-94. Denne værdi repræsenterer en kortklippet græs rigeligt forsynet med vand, beregnet vha. Makkings metode. Den potentielle fordampning for andre vegetationstyper i området antages at afvige fra ovenstående værdi. Baseret på Karup å undersøgelsen (Henriksen, 1987) blev potentiel og aktuel fordampning skønnet for græs, korn, rodfrugt, nåleskov, løvskov og vådområder. Der blev anvendt en simpel rodzonemodel til beregning af aktuel fordampning for 3 areal typer: landbrug (sandjord), landbrug (lerjord) og skov (sandjord). For modelområdet som helhed blev den aktuelle fordampning estimeret til 450 mm/år.

Den overfladenære afstrømning blev defineret som overfladisk afstrømning, interflow og drænvands-afstrømning (gennem de øverste jordlag som kun er mættede i den del af året). Overfladenær

afstrømning vurderes primært at afhænge af topografi og jordtype. For modelområdet som helhed blev den overfladiske afstrømning skønnet til at udgøre 2-7 % af den årlige nedbør (baseret på en analyse af målte afstrømninger ved vandføringsstationer) eller 20-75 mm/år med et estimeret gennemsnit på 50 mm/år. Interflow og drænaflow blev estimeret til 200-250 mm/år i modelområdet. Den overfladenære afstrømning blev dermed samlet skønnet til 260 mm/år.

Baseret på ovennævnte estimater for overfladevandssystemet, blev den gennemsnitlige grundvandsdannelse indenfor modelområdet opgjort til 240 mm/år, se tabel 1.

Tabel 1 Estimeret vandbalance for modelområdet.

Vandbalance for modelområdet	mm/år
INPUT:	
Nedbør	950
OUTPUT:	
Aktuel fordampning	450
Overfladenær afstrømning	260
INPUT-OUTPUT:	
Nettonedbør	500
Grundvandsdannelse (til stationær model)	240

Baseret på tidsserier månedlig afstrømning ved målestationer i området, 12 måneders glidende gennemsnitsværdier og årlige minimumsafstrømninger for 1966-94 blev det vurderet, dels at medianminimum udgjorde 5.5 l/s/km², dels at året 1994 havde en minimumsværdi, der lå tæt på medianminimum. Der forelå synkronmålinger fra 1979 og 1989-94 for området. Data fra den seneste synkronmålingsrunde blev valgt til kalibrering af modellen. Der var en væsentlig forskel på de to målerunder, som resulterer i usikkerhed på den kalibrerede model i forhold til medianminimumsværdierne. Medianminimumsafstrømninger for delstrækninger (baseflow) blev udtaget på kort (1:50.000) og sammenlignet. Data for 1989-94 viste sig systematisk at ligge over 1979-værdierne. Usikkerheden på synkronmålingerne blev anslået til 5-10% for vandføringsmålingen ved den enkelte vandløbslokalitet. Transformerings af målingen til et medianminimumsskøn ved hjælp af tidsseriedata ved nærliggende faste målestationer medfører, at den samlede usikkerhed bliver større (hydrologisk fejl). Data for delstrækninger bliver beregnet ved at trække en eller flere opstrøms værdier fra nedstrøms værdier, og denne subtraktion resulterer i en forøgelse af usikkerheden. Hvor der er betydelig vandføring både opstrøms og nedstrøms anslås den totale fejl (usikkerhed) på inputværdier til 15-25 % for en enkelt delstrækning.

Månedlige observationer af trykniveau ved udvalgte pejlestationer blev analyseret, og det blev konkluderet, at der var sæsonvariationer i grundvandsstanden på mellem $\pm 1,0$ og $\pm 1,5$ m, en periodisk trend (fra år til år) der varierede mellem kote 19,5 og 20,5 m, at minimumsværdien indtraf i 1976, og at efteråret 1994 var karakteriseret ved relativt højt grundvandspotentiale som følge af betydelig nedbør.

Variationen i trykniveau har betydning for den stationære kalibrering af modellen, specielt med hensyn til anvendte data fra PC Jupiter. Der forelå imidlertid synkronmålinger fra marts og august 1995, som gav grundlag for at bestemme såvel fordelingen indenfor modelområdet som sæsonvariationen mellem de to målerunder. Trykniveaudata blev udtrukket fra Jupiter databasen indenfor et område, som udstrakte sig 5 km udenfor modelområdet i alle retninger. Observationer fra Jupiter fra perioden 1970-90 blev anvendt. Data blev anvendt uden nogen form for sortering efter sæson o.l., idet det blev antaget, at data i gennemsnit repræsenterer stationære forhold. Data blev opdelt på overfladenært og dybere grundvand på basis af filtermidtpunkter. Havniveau blev anvendt som grænse mellem overfladenært og dybt grundvand. Herefter blev trykniveauet for øvre og dybt grundvand kontureret. Disse potentialebilleder viste, at modelranden falder sammen med grundvandsskel for såvel det overfladenære som det dybe grundvandssystem, samt at trykniveauet i begge systemer tydeligt afspejler både topografisk variation og placering af vandløb i området.

A.3.2 Fastlæggelse af hydrauliske parametre

Størrelse og fordeling af hydraulisk ledningsevne blev baseret på kvalitative regionale skøn og resultater af prøvepumpninger. De kvalitative estimater definerede regionale mønstre og prøvepumpningsresultaterne tilvejebragte lokale værdier til modellen. Disse blev kombineret med henblik på at fastsætte initiale hydrauliske ledningsevneværdier til brug i modellen og variationsramme (til brug ved kalibreringen).

En kvalitativ vurdering af transmissivitetsfordelingen i modellen blev bestemt ud fra borehulslogs, geologiske profiler, og isopach samt strukturelle konturplot. Relative transmissivitetsestimater for høj, medium og lav ledningsevne blev herved fastsat. Kvartæret blev tildelt lave transmissivitetsværdier for den øverste sekvens, og højere værdier for de mellemste og nedre enheder i den centrale og østlige del af modelområdet. Vest for den centrale dybe dal blev Kvartæret tildelt moderate og lave hydrauliske ledningsevneværdier, som reflekterer såvel lokal forekomst af finkornede aflejringer og en aftagende tykkelse af aflejringerne.

De miocæne sedimenter består primært af Arnum Formationen. Kvartæret er i kontakt med Arnum i den vestlige, centrale, sydlige og sydøstlige del af modelområdet. Mod vest er Arnum Formationen finkornet (ler med lag af fint sand), der udgør hele den Miocæne sekvens. Mod øst er Arnum Formationen mere grovkornet og overlejret og underlejret af de sandede Odderup og Ribe Formationer. Miocænet blev indledningsvist tillagt lave transmissivitetsværdier i den vestlige del af modelområdet. Der forelå i alt ca. 25 prøvepumpningsresultater med T-værdi, filterlængde, filtermidtpunkt, samt hydraulisk ledningsevne for såvel Miocæne og Kvartære filtersatte borer (15 korttidsprøvepumpninger og 13 længerevarende prøvepumpninger). Numeriske simuleringer af 3 længerevarende prøvepumpninger blev udført med RADSVM (Mucha og Kærgaard, 1982). Estimater af hydraulisk ledningsevne og magasintal blev bestemt ved "trial-and-error" kalibrering af de simulerede prøvepumpninger. Resultaterne indikerer, at den hydrauliske ledningsevne for de kvartære aflejringer varierer mellem $8 \cdot 10^{-5}$ og $1.2 \cdot 10^{-3}$ m/s og for de miocæne aflejringer mellem $1 \cdot 10^{-4}$ og $9 \cdot 10^{-3}$ m/s. Størrelsesordenen er indenfor variationsrammen for siltet sand, sand og grus (Freeze og Cherry, 1979).

A.3.3 Massebalance estimat

En massebalance blev opstillet for modelområdet på baggrund af den konceptuelle model, klimadata, oppumpningsdata, og baseflow estimater. Grundvandsskel for overfladenære og dybe grundvandsmagasinsystemer blev afgrænset. Det antages, at infiltration af nedbør til grundvandsspejlet er den eneste kilde til grundvandsdannelse. Afstrømning fra grundvandssystemet sker til overfladevandssystemer (vandløb og havet), vandindvindingsboringer og ved underjordisk afstrømning på tværs af modelranden. Afstrømning direkte til havet antages at udgøre en lille del af den samlede afstrømning, som følge af forekomsten af relativt lavpermeable aflejringer i den vestlige del af modelområdet. Udstrømning på tværs af modelrande antages også at udgøre en begrænset del af den samlede afstrømning, baseret på tolkningen af de regionale strømningsretninger. Afstrømning til vandløb og vandindvinding vurderes derfor at udgøre størstedelen af den samlede afstrømning fra grundvandssystemet. Grundvandsdannelsen blev i gennemsnit estimeret til 0.24 m/år baseret på historisk nedbør, fordampning, arealanvendelse og topografi, se tabel 1. Gennemsnitlige afstrømningsværdier på 0.26 og 0.29 m/år blev beregnet ud fra baseflow data og vandindvindinger.

Grundvandsdannelse og samlet afstrømning skal nødvendigvis være ens ved stationære beregninger. Den uafhængige opgørelse af input og output til grundvandssystemet passer rimeligt godt overens. Estimatet understøtter den konceptuelle models antagelse om, at grundvandsdannelse til systemet sker ved infiltration af regnvand og at hovedparten af vandafgivelsen fra grundvandet sker til vandløb og vandindvinding.

A.3.4 Konceptuel model

Det kvartære reservoir i den dybe erosionsdal, hvor mægtigheden er størst, kan opdeles på et øvre reservoir (som i dag i stort omfang anvendes til markvanding), et mellemdybt reservoir beliggende mellem kote –20 m til – 60 m og et dybt reservoir under kote – 80 m. Disse reservoirer er adskilt af mere lavpermeable silt- og lerlag af begrænset udstrækning, hvilket betyder, at der er relativ god hydraulisk kontakt mellem de kvartære reservoirer. Den øvre del af kvartæret er generelt mere lavpermeabel end den nedre del.

I miocenet udgør Ribe Formationen et dybtliggende reservoir i kote ca. –80 til – 90 m med størst mægtighed og overvejende forekommende i den østlige del af modelområdet. Det samme gør sig gældende for den overliggende relativt vandførende Odderup Formation. Miocenet har generelt en højere permeabilitet mod øst.

Bunden af akvifersystemet er defineret ved finkornede miocene sedimenter i en dybde på ca. – 160 m DNN. Toppen af akvifersystemet er defineret af grundvandsspejlet som varierer mellem kote 65 m og kote 1 m. Trykniveaufordelingen i modelområdet er tydeligt påvirket af såvel topografi og vandløbssystemer. Den horisontale strømningsretning udgår fra det nordøstlige hjørne af modelområdet i sydvestlig retning. Vertikale hydrauliske gradienter er nedadrettede i det nordøstlige område og opadrettede i nærheden af større vandløb imod sydøst, syd og vest. Mod øst sker der en dyb grundvandsdannelse fra kvartæret til miocenet. Grundvand fra miocene magasiner strømmer overvejende ud til de kvartære magasiner i den dybe centrale erosionsdal. I dybden er grundvandsstrømningen mod vest begrænset som følge af aftagende hydraulisk ledningsevne. Dybt grundvand strømmer i stedet opad omkring den vestlige afgrænsning af den dybe kvartære dal, for til sidst at afstrømme til vandløb.

Det antages for de stationære forhold at grundvandsdannelsen til magasinsystemet har samme størrelsesorden som summen af baseflow afstrømningen til vandløb og oppumpningen til vandindvindingen.

A.4 VALG AF KODE

Det blev indledningsvist vurderet, at opstilling af 3D-grundvandsmodel for området ville kunne gennemføres mest hensigtsmæssigt ved valg af et af følgende modelværktøjer:

- MIKE SHE model
- MODFLOW model

MIKE SHE modellen blev vurderet at have fortrin fremfor MODFLOW med hensyn til en fuld dynamisk simulering af hele det hydrologiske kredsløb, incl. overfladisk afstrømning, umættet zone, grundvand og vandløbsafstrømning. MODFLOW modellen vurderedes at have fortrin fremfor MIKE-SHE, med hensyn til mulighed for stationære beregninger (afviklingstid) og til veldokumenteret partikelbane modul (PATH3D; Zheng, 1989). Hertil kom et udtrykt ønske fra Ribe Amt om benyttelse af MODFLOW, såfremt denne model vurderedes fuldt anvendelig til opgaven. I samråd mellem Esbjerg Vandforsyning, Ribe Amt og GEUS blev MODFLOW systemet (Model-Cad386; Rumbaugh, 1993) herefter valgt.

Modelkoden er baseret på USGS's modulopbyggede 3D finite differens grundvandsstrømningsmodel MODFLOW (McDonald og Harbaugh, 1988), normalt betegnet MODFLOW. Koden løser den partielle differentiaalligning, der beskriver strømning i to eller tre dimensioner, ved anvendelse af en blok-centreret finite differens tilnærmelse. Løsningen til ligningssystemet er et estimat af trykniveau og flow som funktion af tid og sted. MODFLOW kan simulere strømning ved konstant densitet i et mættet, porøst medium. MODFLOW kan simulere horisontale og vertikale heterogeniteter, artesisk og frit akvifer/akvitard systemer, ikke stationære påvirkninger, og strømning fra eksterne kilder og dræn. MODFLOW blev valgt til studiet på grund af systemets fleksibilitet ved simulering af komplekse akvifer betingelser, relative brugervenlighed, nøjagtighed, og det faktum at modellen er accepteret som en industriel standard.

Modelkoden til partikelbanesimuleringer PATH3D (Zheng, 1991) blev anvendt til estimering af grundvands strømningsveje. Programmet benytter løsningen fra strømningsmodellen på trykniveauet i modelområdet og kan simulere bevægelsen af grundvand og den advective transport af opløste stoffer ved to- eller tre-dimensional stationær eller ikke stationær strømning. PATH3D simulerer grundvands strømningsveje ved først at foretage en hastigheds interpolation som omregner trykniveauer simuleret af MODFLOW til en kontinuert hastighedsfordeling. En numerisk løser anvendes herefter til at "følge" bevægelsen af partikler i dette hastighedsfelt.

Der blev anvendt adskillige support programmer til præ- og postprocessing af modeldata (QuattroPro, Qedit, pMAP, SURFER og ModelCad386).

A.5 MODELOPSÆTNING

A.5.1 Opstilling af regional strømningsmodel

Der er opstillet en 3D-grundvandsmodel (MODFLOW) med maskevidde = 500 m og lagtykkelse = 20 m. Det øverste lag i modellen (> 40 m) har varierende lagtykkelse jf. topografisk variation.

Modellen er opstillet med vandrette beregningslag efter følgende konvention:

lag	kote interval (DNN)
1	> +40 m
2	+20 til +40 m
3	0 til +20 m
4	-20 til 0 m
5	-40 til -20 m
6	-60 til -40 m
7	-80 til -60 m
8	-100 til -80 m
9	-120 til -100 m
10	-140 til -120 m
11	-160 til -140 m

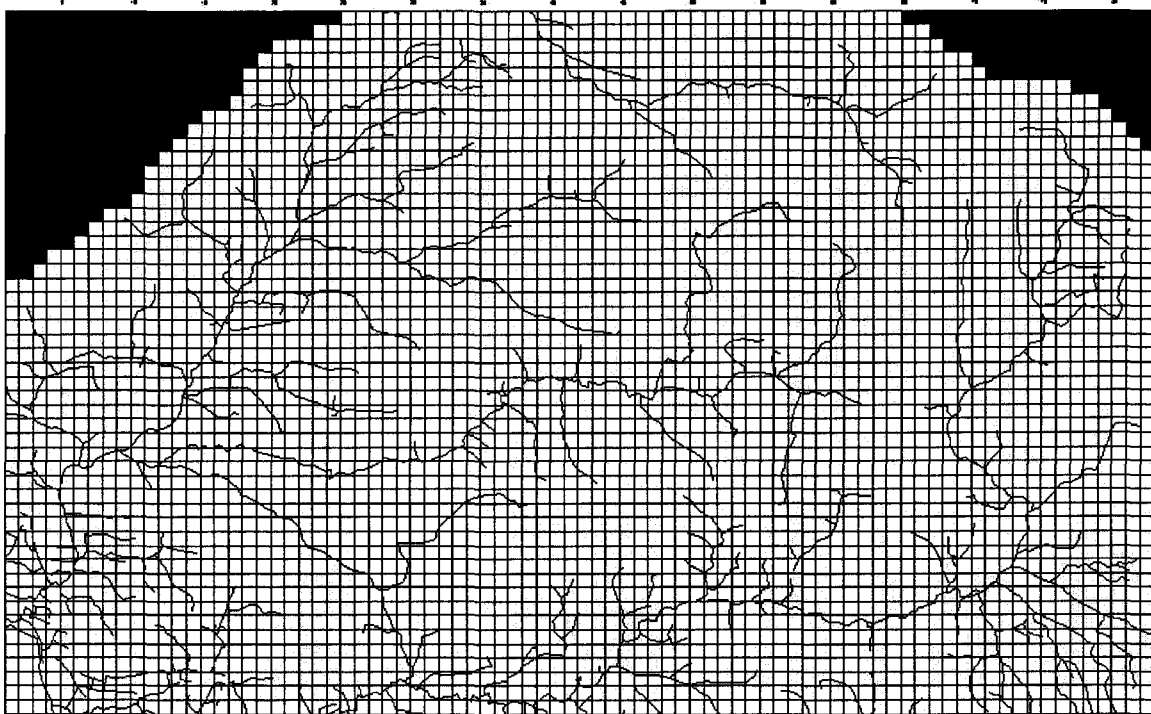
Modelopstilling er valgt af flere årsager. For det første har det været formålet at opstille en 3D model, som giver mulighed for at beskrive partikelbaner i 3 dimensioner, idet en sådan er afgørende for beskrivelse af de særligt grundvands-dannende områder til et givent kildefelt. For det andet er geologien kompleks, men kan i kvartæret i princippet beskrives som bestående af en 'forholdsvis' vandførende 'sandmatrix', i hvilken der er lokaliseret forskellige lavpermeable lerlag. Der er således ingen gennemgående lerlag, som kunne retfærdiggøre en egentlig 'lagdelt model'. For det tredje er 'vandrette beregningslag' foretrukket med henblik på at give en realistisk beskrivelse af 'aflejringsmiljøet' med væsentlig forskel på horisontal og vertikal hydraulisk permeabilitet.

Lag 1 og 2 i modellen er 'inaktive' i områder, hvor terræn ligger hhv. under 40 m i forhold til DNN (centrale del af modelområdet) og under 20 m i forhold til DNN (vestlige del af modelområdet). Lag 3 udgør dermed det øverste beregningslag, som er aktivt i hele modelområdet, og laget er udvalgt i det følgende til illustration af simuleringer i den øvre del af kvartæret. Lag 8 udgør mod øst Ribe Formationen og er i det centrale modelområde det lag, som har interesse i forbindelse med indvinding fra kvartæret i bl.a. Sekjær området. Lag 8 benyttes til illustration af forhold i dybe lag.

A.5.2 Modelopsætning og randbetingelser

Modelområdet er vist i figur 3. Modelområdet udgør samlet $41 \times 25 \text{ km}^2 = 1025 \text{ km}^2$. Heraf er der inaktive områder i øvre venstre hjørne og øvre højre hjørne på i alt ca. 75 km^2 . Effektivt modelareal udgør ca. 950 km^2 . Der er benyttet 'no-flow' randbetingelse langs hele modelranden i alle lag, bortset fra 3 delstrækninger:

- mod nord langs Holme å-dalen i lag 3, hvor denne forsvinder ud af modellen (her er anvendt trykniveau afhængig flow randbetingelse)
- mod syd i lag 8 hvor Ribe Formationen giver anledning til et flow ud af modelområdet (trykniveau afhængig flow randbetingelse)
- mod syd-vest langs kystzonen (trykniveau afhængig flow randbetingelse i lag 3)



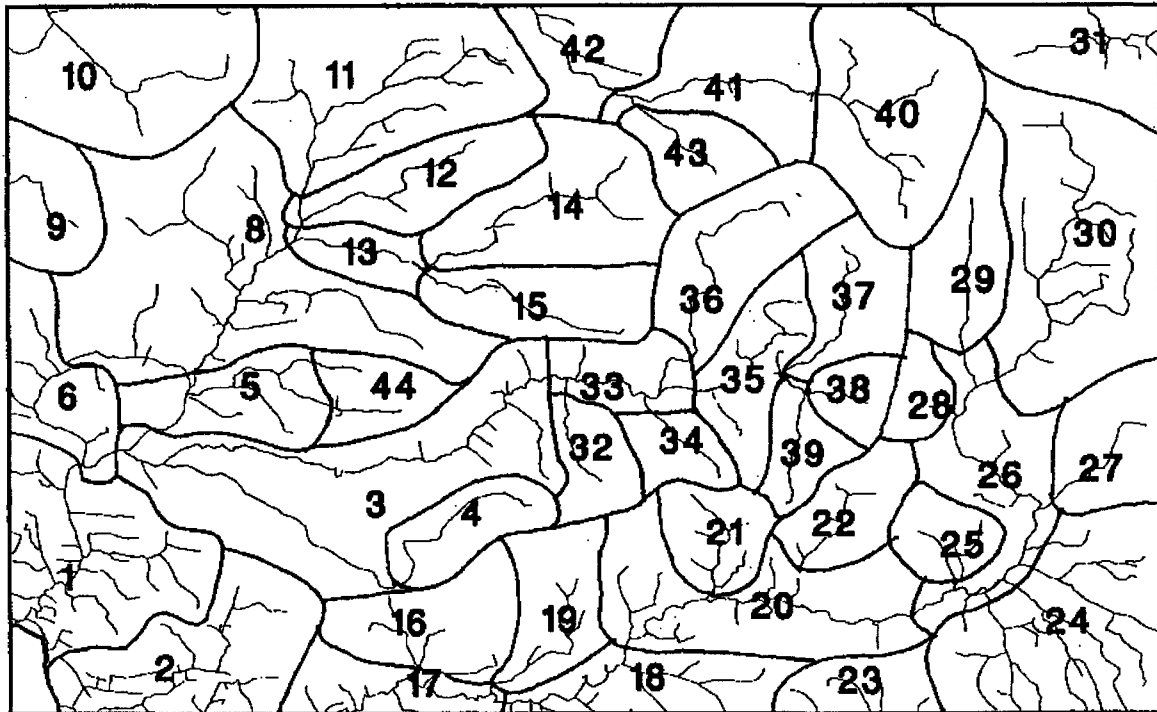
Figur 3 Numerisk repræsentation af modelområdet. De fuldt optrukne linier viser det numerisk net. De sorte områder angiver inaktive celler (no-flow rande).

Modelgrid er opstillet med maskevidde på 500 m i hele modelområdet. Herved er opnået en ensartet detaljering for hele modelområdet, som dels gør modellen mere generelt anvendelig i forbindelse med amtets forvaltning af vandressourcen, dels giver en bedre beskrivelse af de 'relativt' smalle kvartære dalsystemer mod vest, samt udveksling med vandløb.

Vandløb i lag 1 og 2 er indlagt i modellen som 'dræn', mens vandløb i lag 3 er indlagt som 'vandløb' med trykniveau afhængig flow randbetingelse. Vandløbene i lag 1 og 2 udgør de opstrøms dele af vandløbssystemet og 'dræn' randbetingelsen er valgt med henblik på at sikre sig, at

der ikke simuleres udsivning fra de øvre vandløbsstrækninger, i tilfælde af 'udtørring ved forøget oppumpning' ved et af beregningsscenarierne. For de nedre strækninger (lag 3) er der mulighed for udsivning fra vandløb til grundvand ved grundvandsindvinding, hvilket også vil kunne forekomme i naturen.

Modelområdet blev inddelt på i alt 43 delstrækninger ("reaches") med et beregnet baseflow for hver (grundvandsafstrømning). I figur 4 er vist vandløbsstrækninger (med nummersystem) som er defineret af hensyn til samlede vurderinger af påvirkninger på delstrækninger.



Figur 4 Opdeling af vandløbssystemet i delstrækninger (reaches). I hvert af de 43 områder forefindes der estimater for medianminimum.

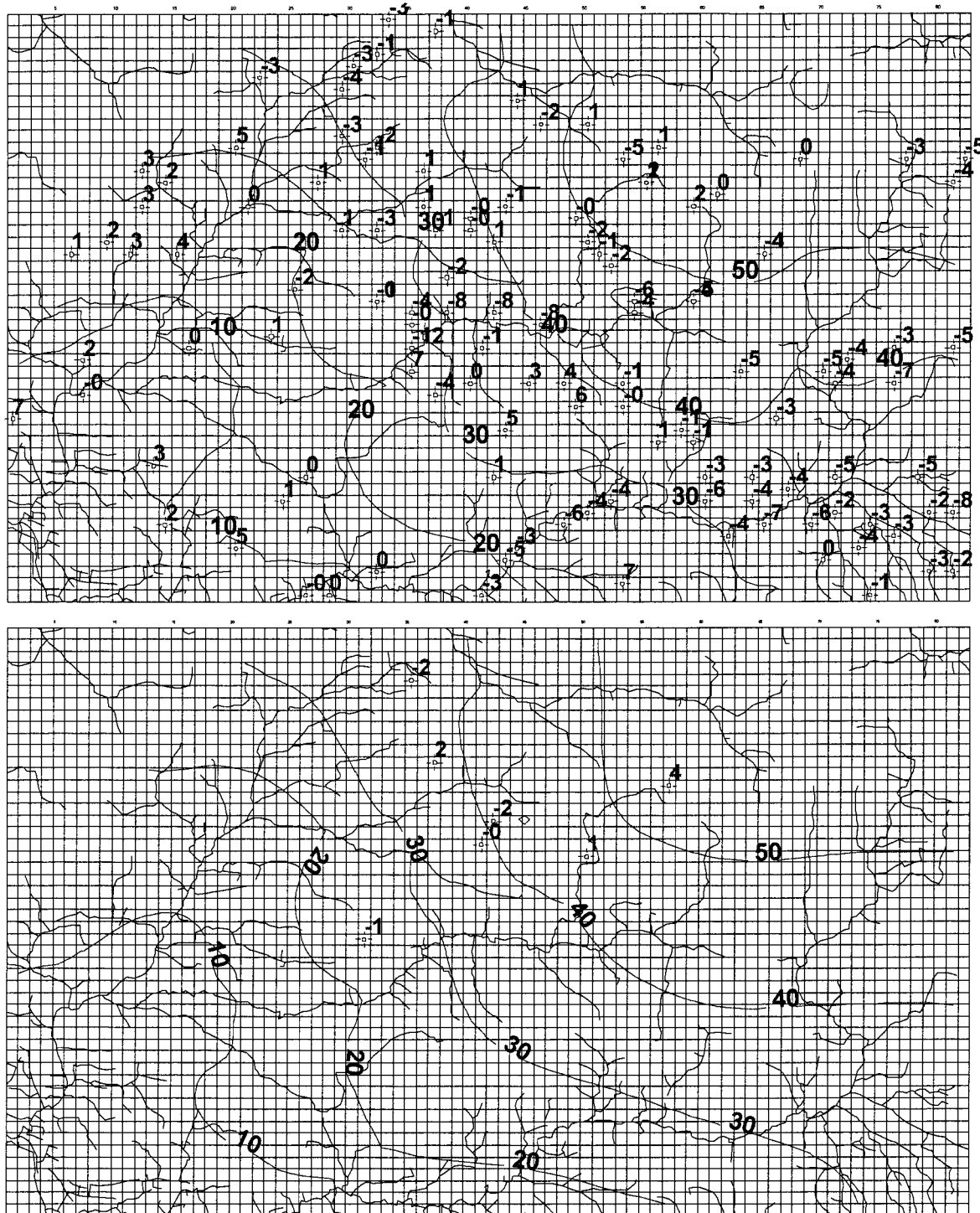
A.6 KALIBRERING AF MODEL

Grundvandsmodellen er kalibreret på baggrund af:

- trykniveau målinger fra Jupiter databasen
- synkronpejlinger af trykniveau fra marts 1995
- synkronpejlinger af trykniveau fra august 1995
- medianminimumsafstrømninger i vandløb fra 1989-94

A.6.1 Kalibreringsresultat

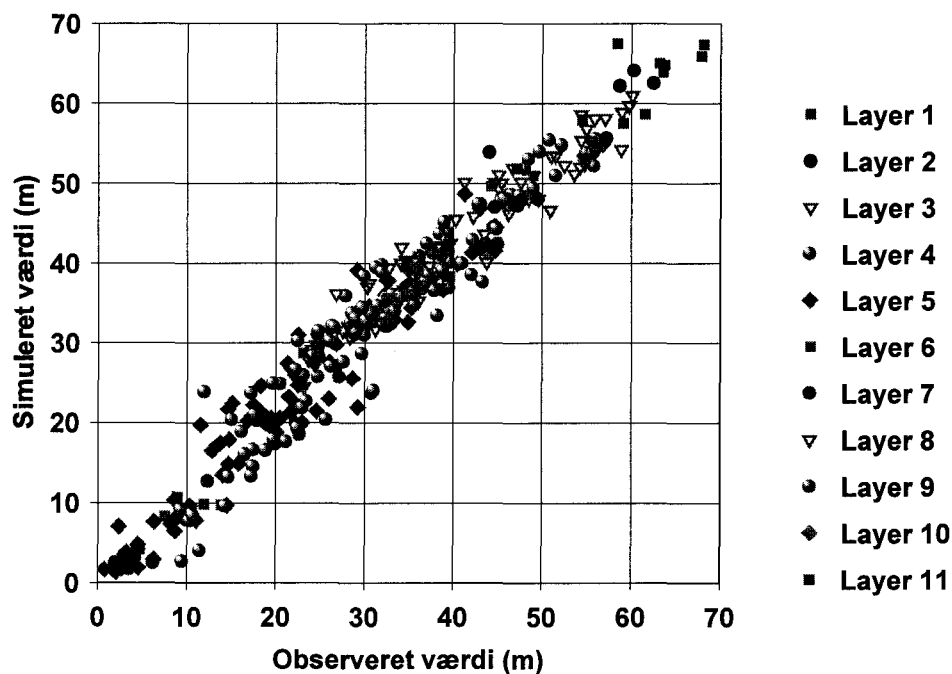
I figur 5 er vist simuleret trykniveau for lag 3 og 8 samt afvigelser mellem målt og simuleret trykniveau. Lag 3 repræsenterer intervallet mellem kote 0 og 20 m og er det øverste gennemgående lag i hele modelområdet. Lag 8 repræsenterer intervallet mellem kote -80 og -100 m.



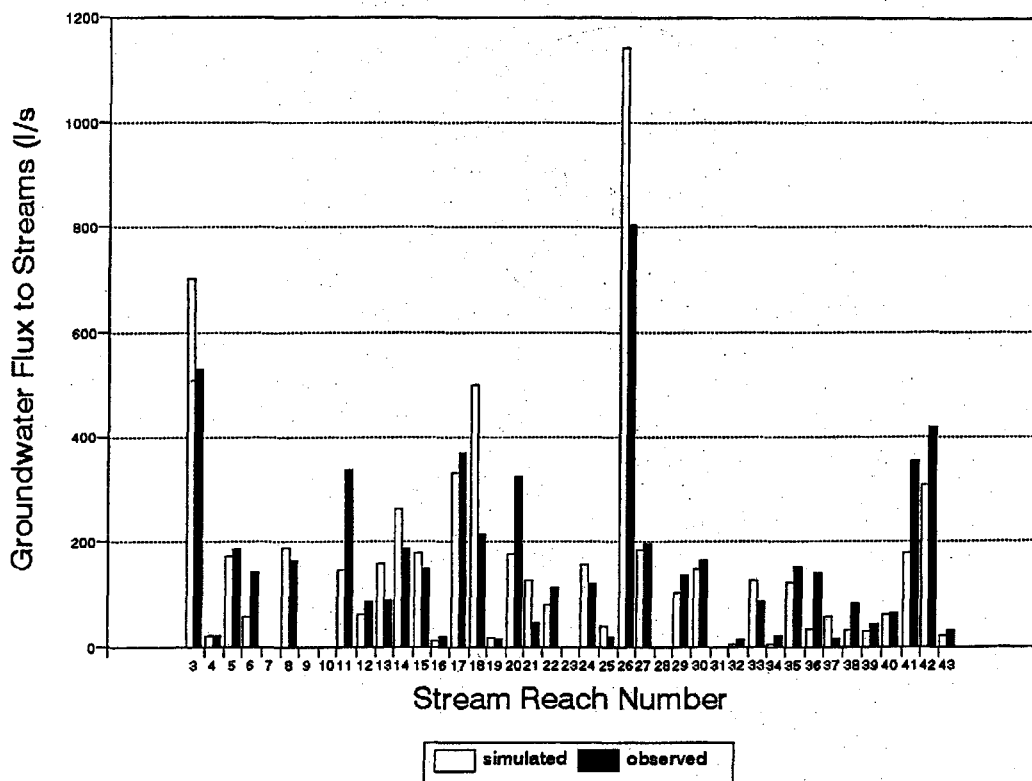
Figur 5 Simuleret trykniveau for lag 3 (øverst) og lag 8 (nederst) vist som konturlinier. For hvert observationspunkt er afvigelsen mellem observeret og simuleret trykniveau angivet.

I figur 6 er vist resultatet af kalibreringen af modellen ved xy-plot af observeret trykniveau mod simuleret trykniveau (scatter-plot). I figur 7 er vist en sammenstilling af observeret medianminimumsvandføring mod simuleret grundvandsafstrømning. Kalibreringsresultatet fremgår af statistikken vist i tabel 2.

Observeret mod simuleret trykniveau



Figur 6 Scatterplot, som viser observeret mod simuleret hydraulisk trykniveau.



Figur 7 Observeret medianminimumsafstrømning og simuleret grundvandsafstrømning.

Tabel 2 Kalibreringsresultat

	Synkronmåling marts 1995	Synkronmåling august 1995	Jupiter datagrundlag
HELE MODELLEN			
Antal målepunkter	65	48	471
Middel afvigelse, ME (m)	-0.70	0.36	0.40
Standard afvigelse (m)	1.82	1.63	2.96
RMS-værdi (m)	1.94	1.66	2.98
Korrelationskoefficient	0.99	0.99	0.98
LAG 1- antal målepunkter	0	0	50
RMS-værdi (m)	-	-	2.83
LAG 2- antal målepunkter	13	4	136
RMS-værdi (m)	2.35	2.27	3.04
LAG 3- antal målepunkter	13	9	142
RMS-værdi (m)	2.09	1.81	3.08
LAG 4- antal målepunkter	8	6	100
RMS-værdi (m)	1.42	1.25	2.84
LAG 5- antal målepunkter	10	8	23
RMS-værdi (m)	1.38	1.44	3.14
LAG 6- antal målepunkter	4	4	12
RMS-værdi (m)	1.92	1.44	1.86
LAG 7- antal målepunkter	5	5	7
RMS-værdi (m)	1.75	1.81	3.76
LAG 8- antal målepunkter	7	7	0
RMS-værdi (m)	1.80	1.37	-
LAG 9- antal målepunkter	4	4	0
RMS-værdi (m)	2.52	2.05	-
LAG 10-antal målepunkter	1	1	1
RMS-værdi (m)	1.51	0.63	3.39

Den summerede massebalance for hele modellen er sammenfattet i tabel 3.

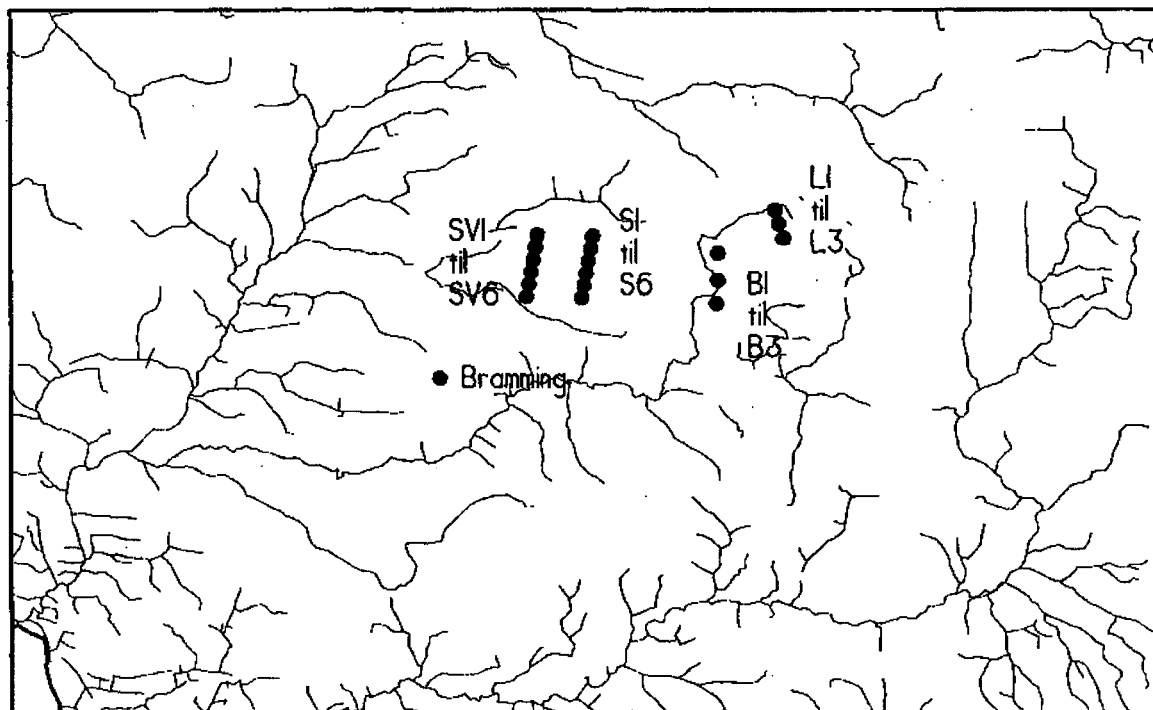
Tabel 3 Summeret massebalance (i l/s og mm/år).

Vandbalance størrelse	l/s (%)	mm/år
Ind i modellen:		
Grundvandsdannelse	7247 (98)	ca. 240
Lækage fra vandløb	106 (2)	ca. 4
Indstrømning gennem trykniveauafhængig flow-rand	34 (0)	ca. 1
Total ind	7387 (100)	ca. 245
Ud af modellen:		
Oppumpning i borer	719(10)	ca. 25
Afstrømning til øvre vandløb (vandløbsgrids i lag 1 og 2)	3826 (52)	ca. 125
Afstrømning til nedre vandløb (vandløbsgrids i lag 3)	2443 (33)	ca. 80
Udstrømning gennem trykniveauafhængige rande	399 (5)	ca. 15
Total ud	7387 (100)	ca. 245

A.7 SIMULERINGER

A.7.1 Formulering af beregningsscenarier

Der blev i samråd mellem Esbjerg Vandforsyning og Ribe Amt udvalgt 9 scenarier, som skulle analyseres. I nærværende sammenhæng præsenteres kun 3 scenarier. Resultaterne fra den samlede undersøgelse kan findes i Henriksen et al. (1995). Beskrivelsen af de udvalgte scenarier er vist i tabel 4. Placeringen af de i tabellen nævnte pumpeboringer fremgår af figur 8.



Figur 8 Placering af pumpeboringer for de analyserede scenarier.

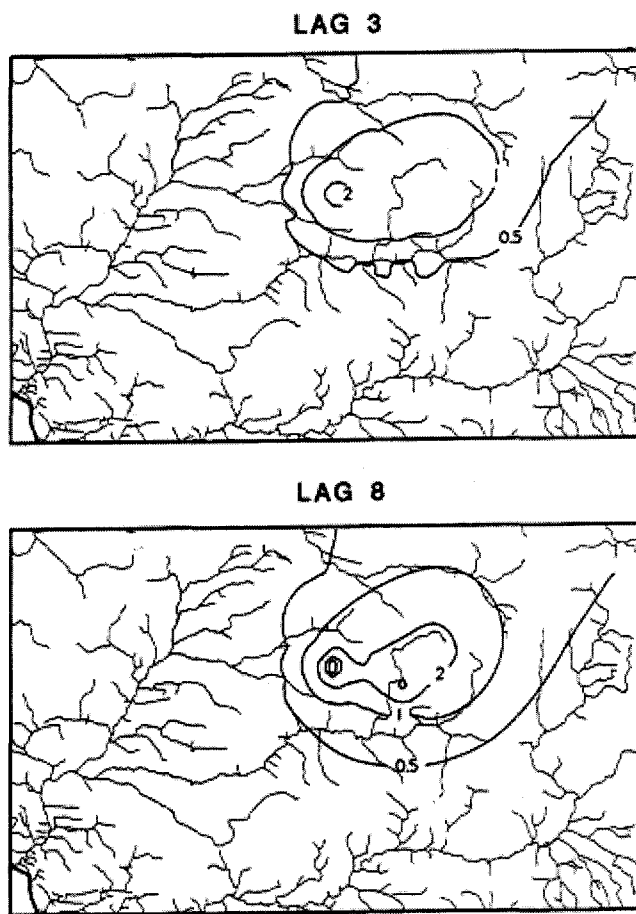
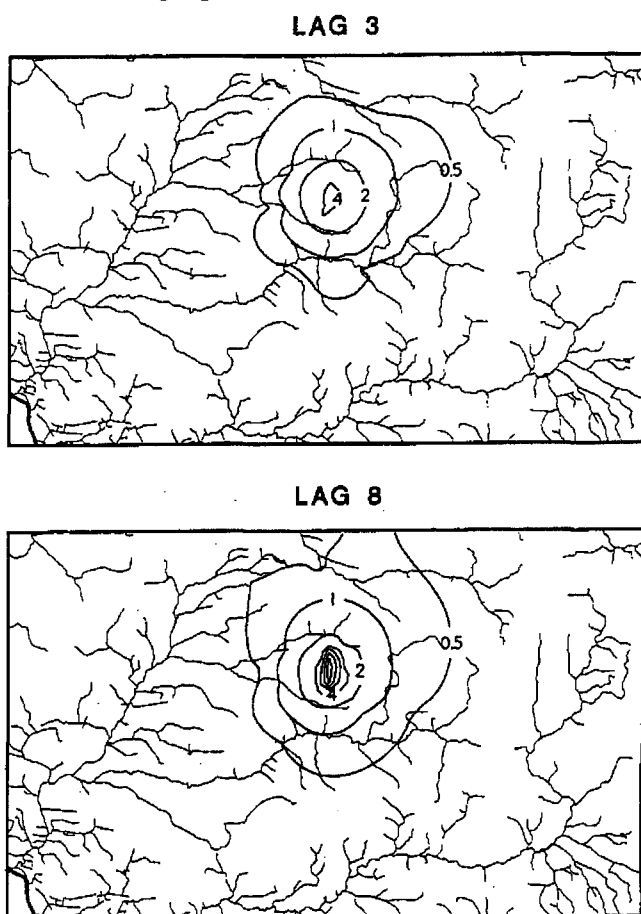
Tabel 4 Udvalgte beregnings scenarier I-III.

Scenarie beskrivelse	Pumpeboringer/-grids (oppumpning = 1 mill. m ³ /pumpeboring)
I 6 mill. m ³ fra Sekjær området	s1 + s2 + s3 + s4 + s5 + s6
II 2 mill. m ³ fra hver af områderne Sekjær, Bøgeskov og Lindknud	s3 + s4 + b1 + b2 + l1 + l3
III 3 mill. m ³ fra hvert af områderne: Sekjær, Bøgeskov og Lindknud	s3 + s4 + s5 + b1 + b2 + b3 + l1 + l2 + l3

Bemærk at boringer s1 - s6 er nummereret med nr. 1 som den sydligst beliggende og nr. 6 som den nordligste (fig. 8). Gælder også øvrige områder.

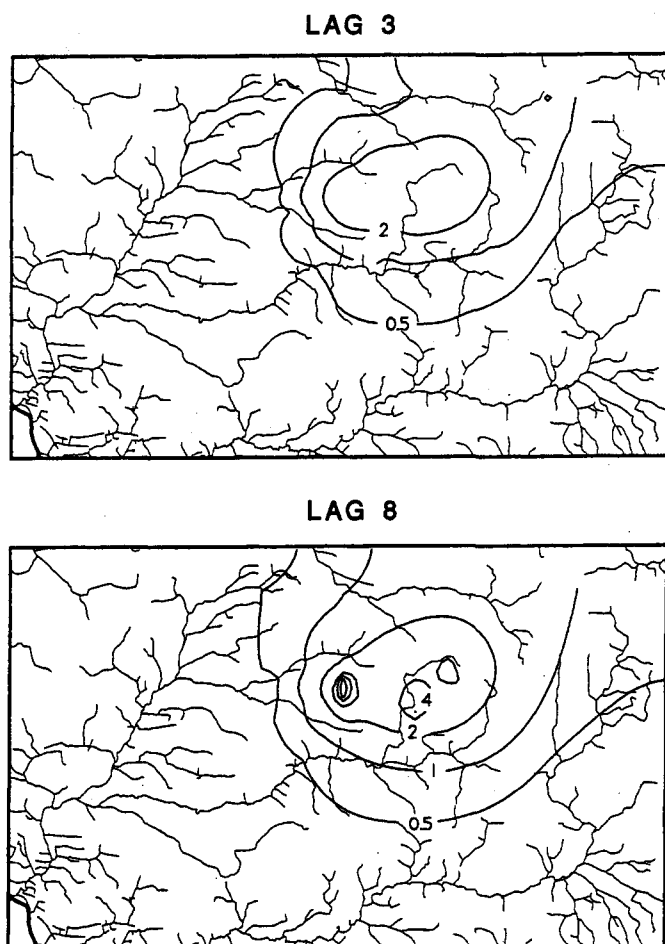
A.7.2 Afsænkning af grundvandspejl

Simuleret afsænkning af trykniveau i lag 3 og lag 8 er vist i figur 9-11. De beregnede afsænkninger breder sig ud over et relativt stort område, og lokalt omkring pumpeboringer (modelgrids 500x500 m) ses afsænkninger omkring 5 - 15 m. I tabel 5 er simulerede afsænkninger sammenstillet i udvalgte punkter.



Figur 9 Afsænkning i lag 3 og 8 ved scenarie I. Konturinterval på 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 m.

Figur 10 Afsænkning i lag 3 og 8 ved scenarie II. Konturinterval på 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 m.



Figur 11 Afsækning i lag 3 og 8 ved scenarie III. Konturinterval på 0,5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 m.

Ved scenarie I ses afsækninger i lag 3 i den øvre del af kvartæret på 0,5 m i en afstand af ca. 10 km fra kildepladsen ved Sekjær. I området mellem Nørrebæk og Sekjær bæk ses afsækninger på 2-4 m. I lag 8 i den dybe del af kvartæret ses afsækninger på 2-10 m i området mellem Nørrebæk og Sekjær bæk (fig. 9).

Ved scenarie II ses større afsækninger omkring Stilde å (fig.10).

Ved scenarie III ses afsækninger i et større område mellem Nørrebæk, Sekjær bæk og Stilde å på omkring 2 m i øvre del af kvartæret, i lag 3 (fig. 11). Afsækningen breder sig ud til modelranden i et stort område. Scenarie III svarer til scenarie II, bortset fra en 50 % større indvinding fra hver kildeplads (indvinding på i alt 9 mill. m³). Afsækningerne i nogen afstand fra kildepladserne viser sig at være proportionale med indvindingsmængden. Lige omkring kildepladserne gælder proportionaliteten ikke.

Tabel 5 Simulerede afsænkninger i udvalgte punkter for de tre scenarier.

Scenarie:	I	II	III
I alt, mill. m ³ /år:	6	6	9
Simuleret afsænkning (m)			
Øvre grundvand (0 til 20 m: DNN)			
- Sekjær kildepl.	4.0	2.0	2.2
- Bøgeskov kildepl.	0.9	1.5	2.2
- Lindknud kildepl.	0.5	1.3	2.2
- Kongensvase bro	2.0	1.1	2.0
- Favrskov	2.0	1.2	1.8
- Holsted by	1.0	0.5	0.8
- Hovborg	0.6	0.5	0.7
- Glejbjerg	<0.5	<0.5	<0.5
- Bjøvlund pl.	<0.5	<0.5	<0.5
Nedre grundvand (-80 til -100 m)			
- Sekjær kildepl.	10.0	6.0	8.0
- Bøgeskov kildepl.	0.9	4.0	4.0
- Lindknud kildepl.	0.5	2.0	4.0
- Kongensvase bro	2.0	1.2	2.0
- Favrskov	2.0	1.0	1.8
- Holsted by	1.0	0.6	0.8
- Hovborg	0.6	0.7	1.0
- Glejbjerg	<0.5	<0.5	<0.5
- Bjøvlund pl.	<0.5	<0.5	<0.5

A.7.3 Indvindingsoplande og partikeltransport

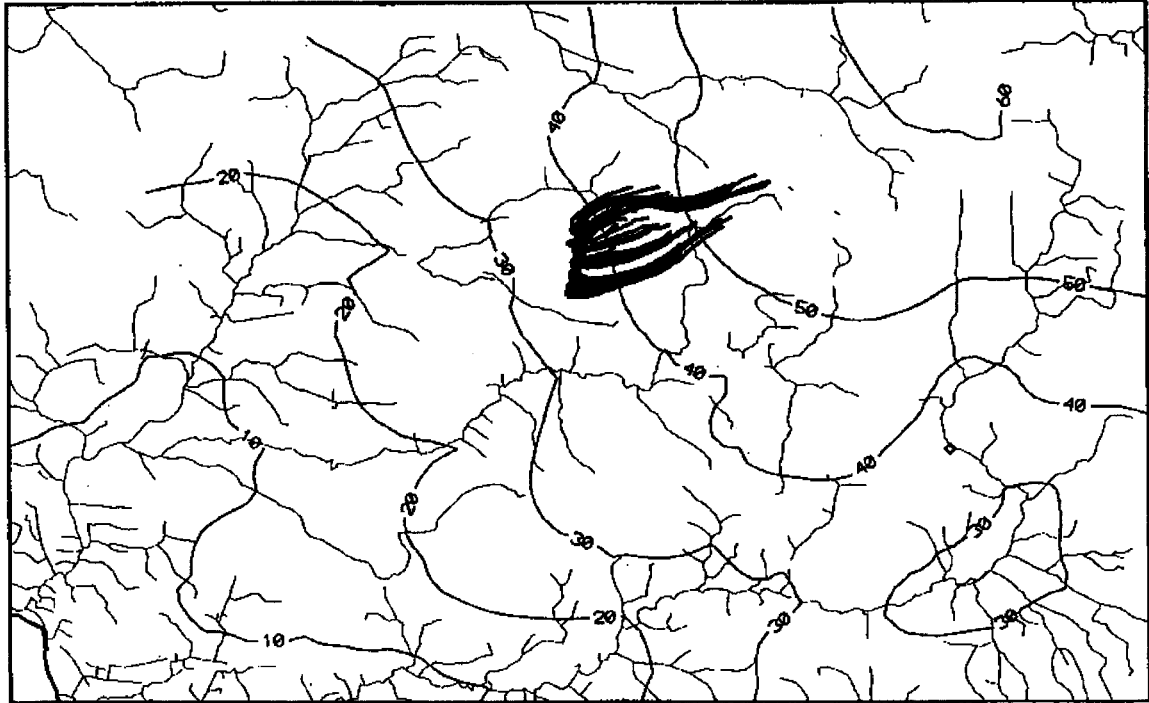
Simulerede partikelbaner og trykniveau i lag 3 er vist i figur 12 - 14. Der er genereret partikelbaner fra 8 punkter i opstrøms retning fra hver boring. En test med 50 punkter gav stort set tilsvarende resultat. De viste partikelbaner repræsenterer en projicering af baner fra samtlige lag. Det areal, som skal beskyttes, omfatter arealet der ligger indenfor en 'omkreds' til partikelbanerne, som på den sikre side skal omfatte en 'sikkerhedszone' jf. usikkerheder på modellen.

For scenarie I viste en test af punkter beliggende i lag 1, 2 og 3, at det areal, som disse repræsenterer, udgør en væsentlig del af 'partikelbane' arealet for samtlige lag. I første omgang er det derfor valgt at belyse samtlige partikelbaner. Der kan efterfølgende foretages supplerende mere detaljerede studier af udvalgte scenarier.

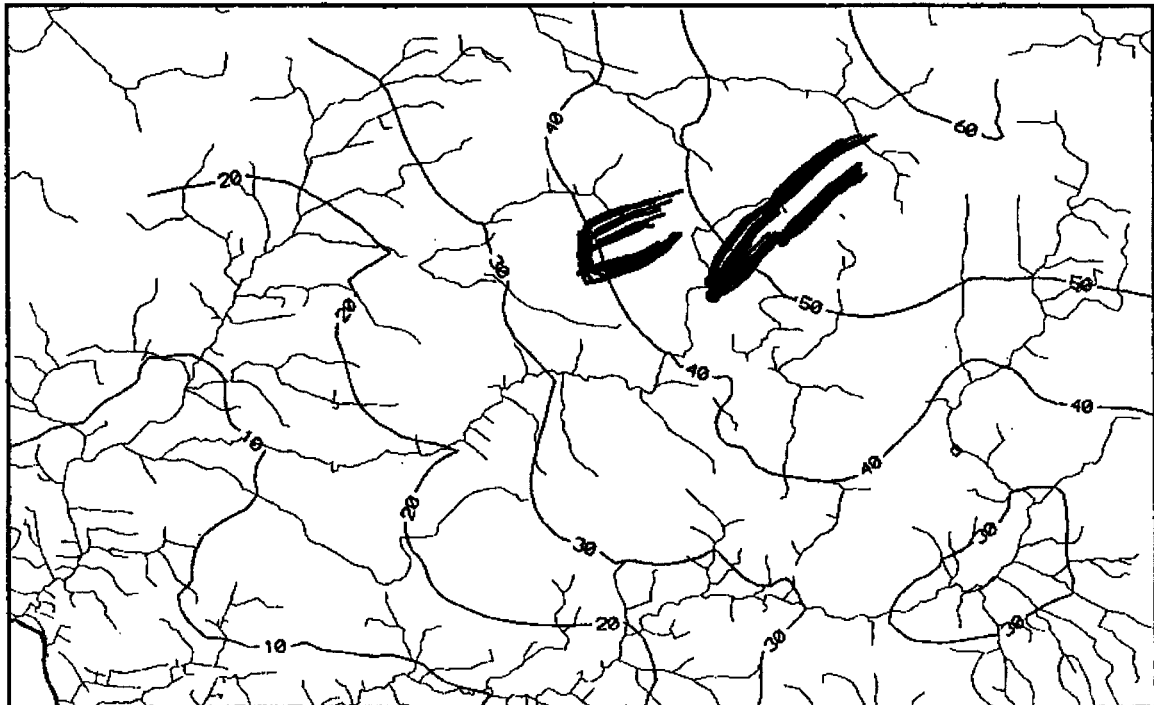
Scenarie I giver et relativt sammenhængende indvindingsopland beliggende mellem Nørrebæk, Sekjær bæk og øvre del af Stilde å (fig. 12).

Scenarie II giver 2 adskilte indvindingsoplande, idet Bøgeskov og Lindknud området til dels 'smelter sammen' til et opland (fig. 13).

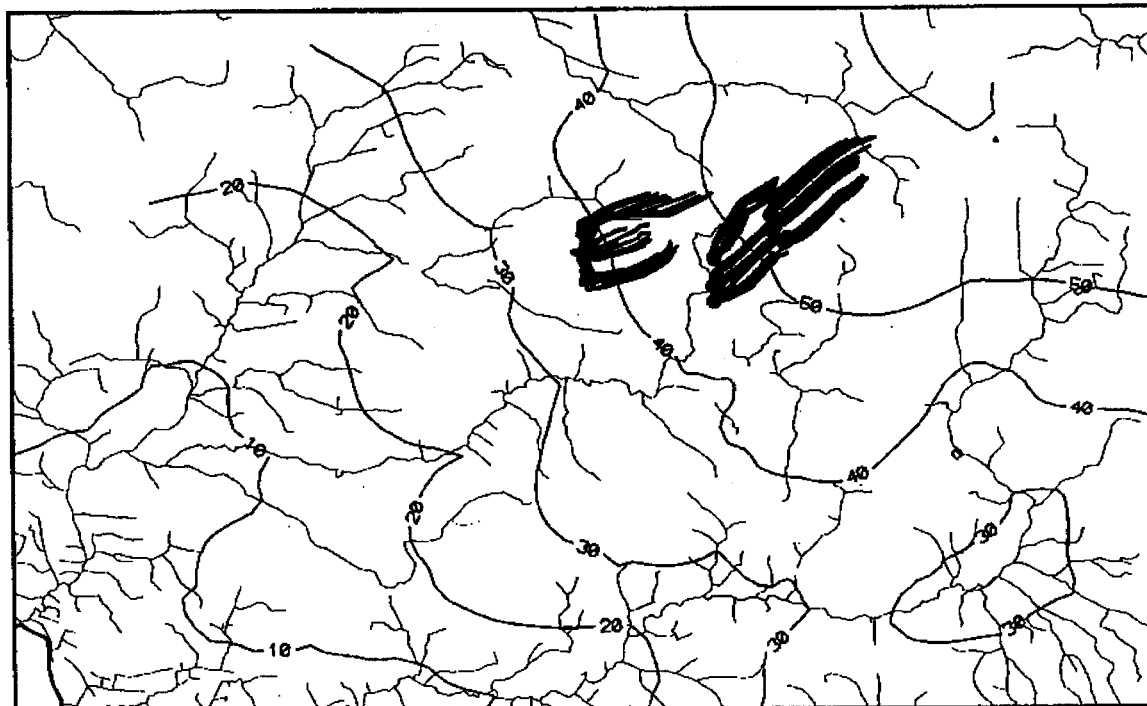
Scenarie III med forøget indvinding giver 'næsten' et sammenhængende opland (fig. 14).



Figur 12 Simulerede partikelbaner og trykniveau for lag 3 ved scenarie I.



Figur 13 Simulerede partikelbaner og trykniveau for lag 3 ved scenarie II.



Figur 14 Simulerede partikelbaner og trykniveau for lag 3 ved scenarie III.

Scenarie I giver samlet det mest kompakte indvindingsopland og dermed et opland, som vil være fordelagtigt med hensyn til nærmere afgrænsning. Det samlede indvindingsopland, som skal beskyttes, vil udgøre i alt ca. 17 km² ved en jævnt fordelt grundvandsdannelse på ca. 350 mm/år og en samlet indvinding på i alt 6 mill. m³. I praksis er grundvandsdannelsen ikke jævnt fordelt indenfor indvindingsoplandet og afhænger af både hydrogeologiske forhold og placering i forhold til vandløb/vandskel. Afgrænsningen af indvindingsoplandet vil være forbundet med nogen usikkerhed. I praksis vil indvindingsoplandet derfor udgøre ca. 3-5 km² pr. mill. m³, der fremtidigt ønskes indvundet fra området eller mellem 20 og 30 km² ved 6 mill. m³.

Det minimale areal, som bør beskyttes, kan bestemmes ud fra nettonedbøren og indvindings størrelse, idet det antages, at der indenfor indvindingsoplandet enten sker nedsivning svarende til nettonedbøren eller ingen nedsivning (på grund af lavpermeable lag og opsivning mod vandløb). Med disse antagelser bliver det minimale areal som skal beskyttes ca. 10 km². En zoneopdelt grundvandsbeskyttelse vil derfor forudsætte et areal på mellem ca. 10 og ca. 30 km² ved en samlet indvinding på i alt 6 mill. m³ pr. år, afhængigt af placering af indvindingsboringer, filtersætning, indvindings størrelse mm.

A.7.4 Påvirkning af minimumsvandføring

Påvirkningen af minimumsvandføringen på strækningsniveau fremgår af tabel 6, hvor hovedresultatet er sammenfattet, udtrykt som simuleret påvirkning i % af nuværende medianminimumsafstrømning.

Tabel 6 Påvirkning af medianminimumsvandføring ved alternative scenarier (påvirkning i % af medianminimum opsummeret på større oplande). Numrene i parentes refererer til delstrækninger af vandløbssystemet, se figur 4.

Opland	I	II	III
Nørrebæk (14)	15	12	13
Sekjær bæk (15)	16	12	12
Stilde å (36)	14	21	33
Øvre Sneum å (11+12+13+14+15)	10	7	8
Holsted å, Holsted (33+34+35+36+38+39)	6	9	14
Holme å, ns Hovborg (40+41+42+43)	5	6	11

Scenarie I giver påvirkninger omkring 15 % for de 3 vandløb: Nørrebæk, Sekjær bæk og Stilde å. Vurderet på baggrund af gennemførte scenarier giver scenarie I en jævn belastning af vandløb i Sneum å systemet. Dette scenarie giver ligeledes mulighed for senere udbygning af de øvrige områder, evt. til lokal anvendelse med efterfølgende udledning af spildevand til øvre del af Holsted å systemet.

Scenarie III, som svarer til scenarie II, blot med 50 % større indvindingsmængde, giver ikke en fuldt proportional påvirkning af vandløb tæt på de 3 kildepladser. Nørrebæk og Sekjær bæk påvirkes således kun begrænset ved 50 % forøget indvinding. Den forøgede påvirkning slår ifølge modellen især igennem for vandløbene i større afstand fra kildepladserne (i Holsted å og Holme å).

A.8 KONKLUSION

Det anbefales primært at udnytte Sekjær området som kildeplads, idet der her kan indvindes mindst 6 mill. m³ uden drastiske vandløbspåvirkninger. Indvindingsoplandet, og dermed det område som skal beskyttes, bliver mest 'koncentreret' ved dette valg, idet der er tale om et sammenhængende område.

Øvrige områder anbefales reserveret til evt. fremtidig anvendelse regionalt eller lokalt i Holsted-Brørup-Vejen området, idet vandindvindingen fra disse områder medfører relativ stor vandløbspåvirkning, som i forbindelse med lokal anvendelse kan elimineres ved genudledning af den indvundne og forbrugte vandmængde til lokal recipient i øvre del af Holsted å systemet (som renset spildevand).

Der er behov for beskyttelse af det samlede ressourceopland til samtlige interesseområder samt at få kortlagt vandkemi i de øvre lag (øvre dele af oplandet til Nørrebæk, Sekjær bæk og Stilde å).

Det anbefales, at der iværksættes et 'fuldskala' pumpeforsøg af varighed på flere måneder i forbindelse med indkøring af Sekjær området, således at modellen kan valideres under 'større stress-påvirkning'.

Det anbefales at fortsætte synkronpejlerunder og kontinuerte registreringer med henblik på kalibrering af dynamisk model, som kan benyttes til nærmere vurdering af nuværende påvirkning fra markvanding på Nørrebæk, Sekjær bæk og Stilde å. En velkalibreret dynamisk model er væsentlig i forbindelse med indkøring og test af Sekjær kildeplads samt detailvurdering af bl.a. variation af indvindingsoplande og grundvandsdannende arealer som følge af klimapåvirkninger.

A.9 REFERENCER

- Freeze, R.A. og Cherry, J.A. (1979) Groundwater. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Harrar, W.G. og Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted å aquifer system: set-up and calibration. Rapport udarbejdet for Esbjerg Kommune, Forsyningsvirksomhederne og Ribe Amtskommune GEUS (43 pp).
- Henriksen, H.J., Harrar, W.G., Morthorst, J., Nyegaard, P. og Dahl, M. (1995) Nye vandindvindingsmuligheder for Esbjerg kommune. Fase IV-model. Rapport udarbejdet for Esbjerg kommune, Forsyningsvirksomhederne. DGU Kunderapport nr. 51, 1995.
- Henriksen, H.J. (1987) Driftformens betydning for afstrømningen fra hedesletteområder. Skov- og Naturstyrelsen. Marginaljorder og miljøinteresser. Miljøministeriets projektundersøgelser 1986, Teknikerrapport nr. 11., 59 pp.
- Mucha og Kærgaard (1982) RAD-SYM pumptest analysis.
- Rumbaugh, J.O. (1993) 'ModelCad386 – Computer Aided Design Software for Groundwater Modeling'. Vol. 1. March 1993. Geraghy&Millar, Inc. Modeling Group. 10700 Parkridge Boulevard, Suite 600. Reston Virginia, 22091, USA
- Zheng, C. (1991) 'PATH3D – a ground-water path and travel-time simulator'. S.S. Papadopoulos&Associates, Inc. Environmental & Water-Ressource Conculants, 7944 Wisconsin Avenue, Bethesda, Maryland 20814, USA

INVERS KALIBRERING AF DK-MODEL SØNDERJYLLAND

Torben Obel Sonnenborg, Britt S.B. Christensen og Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Invers kalibrering, automatisk parameterestimation, parameterusikkerhed, DK-model Sønderjylland

ABSTRACT: Anvendelse af DK-modellerne som et værktøj til analyse af Danmarks tilgængelige drikkevandsressource er stærkt afhængig af, at modellerne er velkalibrerede. Med det formål for at forbedre modellernes evne til at reproducere grundvandsmagasinerne dynamik, er der udviklet en invers kalibreringsprocedure, som gør det muligt at estimere de vigtigste grundvandsparametre ud fra objektive kriterier. I dette notat beskrives resultaterne af invers kalibrering af DK-model Sønderjylland. Det illustreres, hvordan den inverse model kan anvendes dels til at identificere, hvilke parametre der skal inkluderes i kalibreringsprocessen, dels til at optimere den opstillede model og tilvejebringe estimater for modelparametrene. Pålideligheden af de estimerede parametre vurderes bl.a. ud fra de beregnede usikkerhedsestimater. Generelt vurderes både de estimerede parametre og den resulterende overensstemmelse mellem observerede data og modelsimuleringer at være tilfredsstillende.

B.1 INDLEDNING

DK-modellerne for Fyn (Henriksen et al., 1997) og Sjælland (Henriksen et al., 1998) blev kalibreret manuelt mod transiente observationer af hydraulisk trykniveau og vandløbsafstrømning. Det er efterfølgende fundet ønskeligt at anvende automatisk kalibrering af DK-modellerne, hovedsageligt pga. følgende faktorer: (1) Manuel kalibrering med en ikke-stationær model på størrelse med en typisk DK-model kan være en vanskelig og uoverskuelig opgave, (2) automatisk kalibrering er forbundet med en mindre grad af subjektivitet, (3) automatisk kalibrering kan resultere i bedre kalibreringsresultater og (4) hvis den automatiske kalibrering formuleres i en statistisk sammenhæng vil der være mulighed for kvantificering af eksempelvis parameterusikkerhed og parameterkorrelation.

I forbindelse med kalibrering af DK-model Sønderjylland blev det derfor besluttet at udvikle en automatisk (invers) optimeringsprocedure til MIKE SHE, der anvendes som hydrologisk model. Som optimeringsalgoritme blev UCODE (Poeter and Hill, 1998) valgt. UCODE er et generelt optimeringsværktøj, som er udviklet ved USGS i Denver, med det primære formål at kunne anvendes til parameterestimation i forbindelse med grundvandsrelaterede problemstillinger.

Da ikke-stationær modellering med MIKE SHE på systemer svarende til en typisk DK-model (dvs. problemstilling og antal numeriske celler) er forbundet med lange simuleringstider (af størrelsesorden dage), er det vanskeligt at udføre invers modellering med den ikke-stationære model. Det er derfor besluttet at basere den inverse model på en stationær version af MIKE SHE (<http://www.vandmodel.dk/balance.htm>).

I det følgende beskrives kalibreringen af DK-model Sønderjylland under anvendelse af invers optimering. Først beskrives udvælgelsen af kalibreringsdata og vurderingen af datamaterialets kvalitet. Dernæst fastsættes såvel kvantitative som kvalitative kalibreringskriterier. Valg af kalibreringsparametre gennemgås i afsnit 4, som efterfølges af en beskrivelse af den anvendte estimationsmetode. Endelig præsenteres resultaterne af estimationsprocessen både mht. de optimerede parametre og overensstemmelsen mellem observationsdata og modelsimuleringer.

B.2 OBSERVATIONSDATA

Til kalibreringen af den stationære model er der anvendt observationer af hydraulisk trykniveau og median minimum. I det følgende beskrives udvælgelsen af data samt usikkerheden på disse.

B.2.1 Hydraulisk trykniveau

De observerede trykniveaudata stammer fra Jupiter databasen, hvorfra observationer foretaget efter 1970 er anvendt. I de terrænnære beregningslag er der relativt mange data til rådighed, og der er derfor foretaget en reduktion af datagrundlaget efter følgende retningslinier: (1) Der inkluderes kun data fra en boring pr. numerisk element, (2) i de tilfælde, hvor der er flere målinger til stede i en boring, er der foretaget en aritmetrisk midling af data, (3) det tilstræbes at opnå en jævn fordeling af observationsdata indenfor hvert enkelt beregningslag, og (4) observationsværdier, der afviger markant fra det generelle trykniveaubillede i området, elimineres. Med det formål at identificere afvigende målinger blev det observerede trykniveau for hvert beregningslag kontureret og punkt-målingernes værdi blev påført. Herved kunne "outliers" erkendes og forkastes som kalibreringsdata.

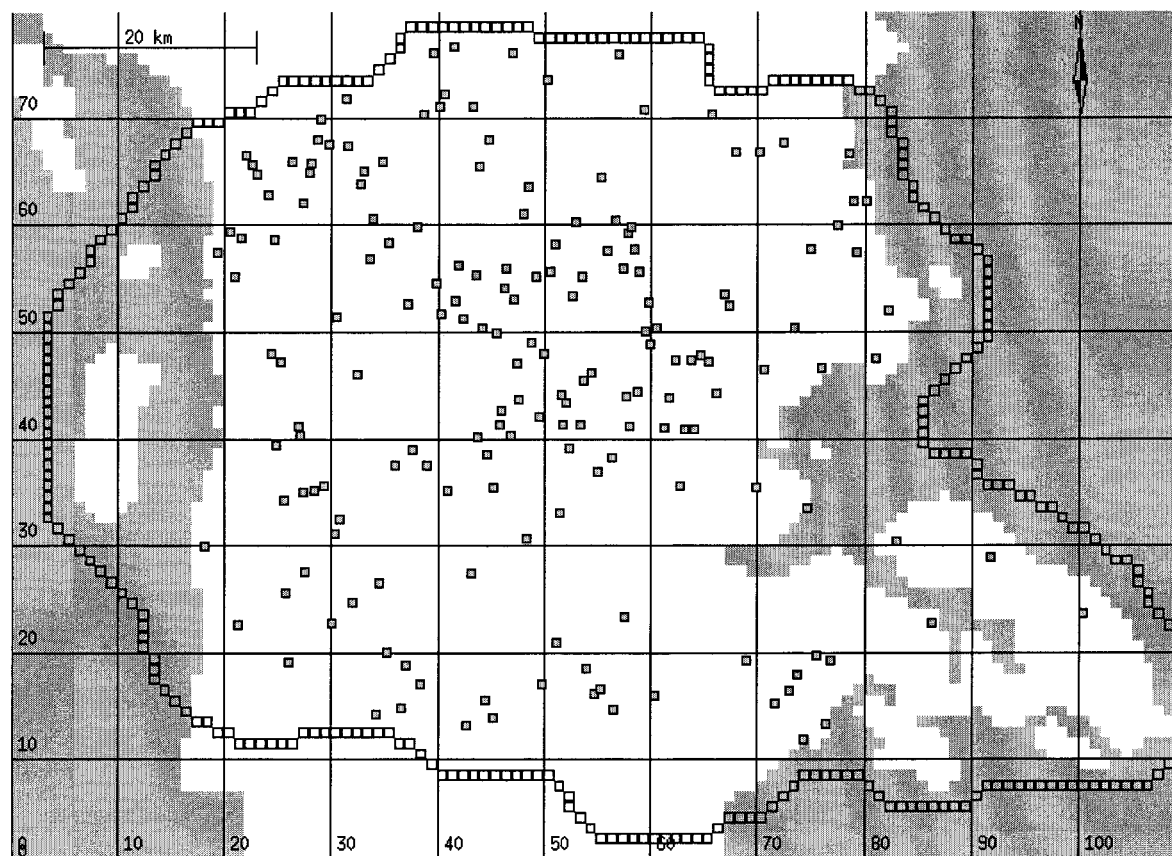
Ovenstående procedure resulterede i udvælgelse af 1221 observationsværdier fordelt på de 16 beregningslag. Densiteten af data er størst i de øverste beregningslag og falder signifikant med dybden, se tabel 1. Der er således kun 6 observationer til rådighed i lag 16, som er beliggende mellem kote -180 og -220 m. I figur 1 ses et eksempel på fordelingen af observationsboringer inkluderet i modelkalibreringen (fra beregningslag 3).

Der er ikke foretaget nogen vurdering af de observerede trykniveaudata mht., hvornår på året de er målt. Det antages imidlertid, at målingerne er gennemført jævnt fordelt over året (for alle boringerne under ét) og at observationerne i middel repræsenterer en gennemsnitstilstand i reservoiret.

Da der anvendes en stationær model vil usikkerheden på trykniveaudata pga. ikke-stationære effekter være signifikant. Desuden vil der optræde måle- og modelfejl (samlet benævnt observationsfejl) som skyldes måleusikkerhed, ikke beskrevet variation i topografi, interpolation af beregnet trykniveau, usikkerhed mht. den vertikale placering af filtersætning samt den numeriske repræsentation af denne, og ikke modelleret geologisk heterogenitet. Tilsammen vurderes usikkerheden på trykniveaudata i området at variere fra 3 til 5 m (udtrykt ved standardafvigelsen). Den største usikkerhed er tillagt observationer fra de øverste beregningslag, dels pga. en markant effekt fra den grove beskrivelse af topografien (1 x 1 km grid), dels pga. usikkerhed på placering og indvindingsgrad fra terrænnære markvandsboringer.

Tabel 1 Antal observationer af hydraulisk trykniveau udvalgt til kalibrering fra hvert beregningslag. Standardafvigelsen på de enkelte lags observationer er også anført.

Beregningslag	Laggrænser (kote i m)	Antal observationer	Standardafvigelse (m)
1	terræn – GVS	224	5
2	GVS – variabel	191	5
3	variabel - -10	177	5
4	-10 - -20	207	5
5	-20 - -30	156	4
6	-30 - -40	94	4
7	-40 - -50	44	4
8	-50 - -60	20	3
9	-60 - -70	13	3
10	-70 - -80	13	3
11	-80 - -90	10	3
12	-90 - -100	12	3
13	-100 - -120	19	3
14	-120 - -140	16	3
15	-140 - -180	18	3
16	-180 - -220	6	3



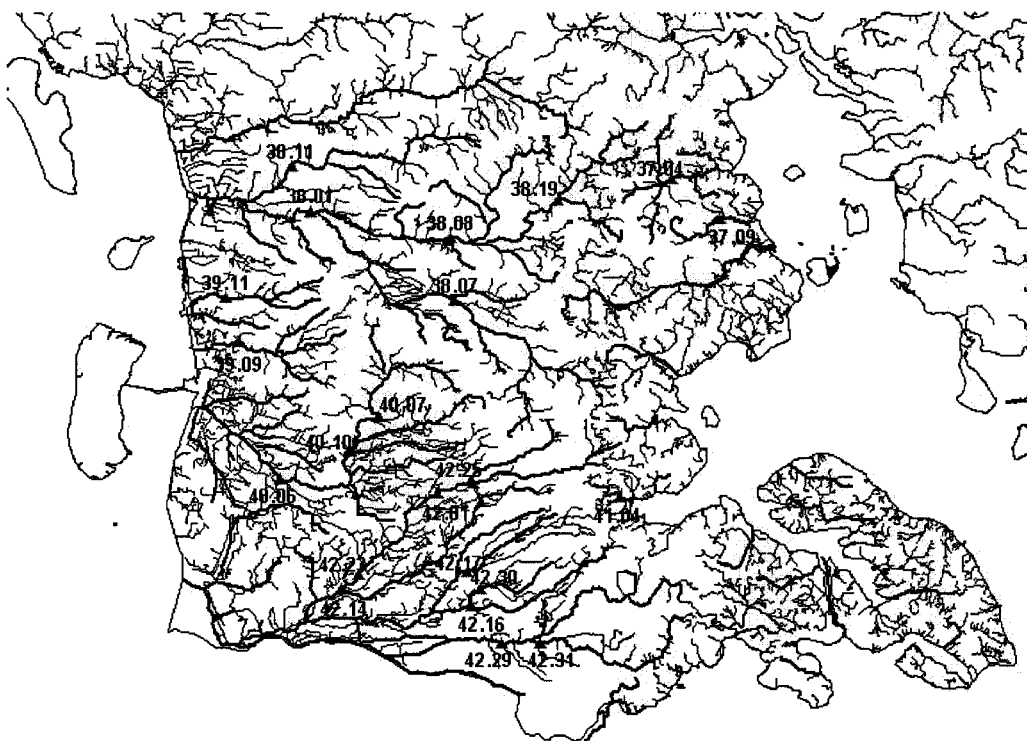
Figur 1 Placering af udvalgte borer med filtersætning i beregningslag 3.

B.1.2 Vandløbsafstrømning

Medianminimumsdata antages i nærværende sammenhæng at repræsentere strømmingen gennem den mættede zone til/fra vandløb. Medianminimumsværdierne kan dermed sammenlignes med grundvandstilstrømningen, der beregnes som Darcy-strømningen til/fra søer og vandløb i den stationære model.

Der er udvalgt 22 stationer, hvorfra medianminimum anvendes til kalibreringen, se figur 2 og tabel 2. De udvalgte stationer, som alle er faste vandføringsstationer, fordeler sig relativt jævnt indenfor modelområdet og repræsenterer et samlet oplandsareal på 1953 km². Medianminimumsestimaterne bygger på en tidsserie på 20 år (Sønderjyllands Amt, 1996). Nogle af de udvalgte stationer udgør deloplande til større oplande (f.eks. er station 38.08 delopland til station 38.01), og det må derfor forventes, at de pågældende vandføringer er korreleret. Korrelationen vurderes dog ikke at være større, end at samtlige data vil give vigtig information i kalibreringsprocessen.

Usikkerheden på medianminimumsdata (samtlige fejl, som modellen ikke kan reproducere) er fastlagt ud fra en analyse af (1) usikkerheden på selve medianminimumsværdien, og (2) modellens evne til at simulere oplande med forskellig karakteristika. Standard afvigelsen er for stationer med vandføring større end 1.0 m³/s vurderet til 10%, ved stationer med vandføring 0.1 – 1.0 m³/s til 20%, ved stationer med medianminimum på 0.05 – 0.10 m³/s til 50%, og for stationer med en vandføring på mindre end 0.05 m³/s til 100%. Usikkerhedsvurderingen er baseret på, at medianminimum er relativt dårligt bestemt ved stationer med lille specifik vandføring, samt at DK-modellen pga. gridstørrelsen på 1 km x 1 km vil være bedre til at simulere afstrømning fra store oplande i forhold til små oplande. I tabel 1 er den vurderede standardafvigelse angivet i kolonnen længst til højre.



Figur 2 Placering af stationer hvorfra medianminimumsdata er anvendt som kalibreringsgrundlag. Vandløb inkluderet i modellen er fremhævet med fed.

Tabel 2 Udvalgte vandføringsstationer og medianminimum for Sønderjyllands Amt (Sønderjyllands Amt, 1996, og Ribe Amt, 1994).

Station nr.	Stationsnavn	Oprettelsesår	Opland (km ²)	Med. min. (l/s/km ²)	Med. min. (l/s)	Standard afv. (l/s)
37.04	Taps Å	1974	66	1.3	85	43
37.09	Sillerup Bæk	1985	30	1.2	35	35
38.01	Ribe Å	1933	680	5.0	3400	340
38.07	Gels Å	1982	168	5.8	980	98
38.08	Gram Å	1983	276	4.4	1210	121
38.11	Hjortvad Å	1985	118	4.4	520	104
38.19	Nørreå	1989	97	1.6	154	31
39.09	Brøns Å	1972	94	3.3	315	63
39.11	Rejsby Å	1988	43	1.0	44	44
40.06	Brede Å (opst.)	1959	290	3.4	1000	100
40.07	Løbæk	1983	96	2.2	210	42
40.10	Ny Havnebæk	1987	23	5.2	119	24
41.04	Slotsmølleå	1986	14	6.5	90	45
42.01	Arnå	1962	103	4.5	455	91
42.14	Vidå	1977	248	4.0	1000	100
42.16	Uge Bæk	1979	45	6.9	310	62
42.17	Sønderup Å	1979	45	3.8	170	34
42.23	Arnå	1985	168	3.4	570	114
42.25	Rødå	1985	53	1.9	100	20
42.29	Sønderå	1986	239	3.4	820	164
42.30	Terkesbøl Å	1986	41	3.7	153	31
42.31	Gejl Å	1986	80	3.0	238	48

B.3 KALIBRERINGSKRITERIER

I det følgende defineres såvel kvantitative som kvalitative kriterier for kalibreringsresultatet. De kvantitative kriterier formuleres ud fra normer, der på forskellig måde udtrykker den gennemsnitlige afvigelse mellem data og model.

ME (mean error eller middelfejl) udtrykker den gennemsnitlige afvigelse mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel. I det følgende defineres *ME* både for trykniveau og medianminimum. For hydraulisk trykniveau fås

$$ME_h = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h_{obs,i} - h_{sim,i}) \quad (1)$$

hvor n er antallet af trykniveauobservationer. *ME* kan give et indtryk af, om der introduceres nogen overordnet fejl i modelresultaterne, dvs. om f.eks. trykniveauet simuleres generelt for lavt eller højt. Hvis $ME \rightarrow 0$, vil der globalt set ikke optræde systematiske fejl i modellen.

For grundvandstilstrømningen anvendes den relative fejl, idet afvigelsen mellem observeret og simuleret vandføring skaleres med den observerede vandføring. Middelfejlen kan hermed udtrykkes som

$$ME_Q = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\frac{Q_{obs,j} - Q_{sim,j}}{Q_{obs,j}} \right) \quad (2)$$

hvor m er antallet af medianminimumsdata ($Q_{obs,j} > 0$).

RMS (root mean squared error eller middelværdien af kvadratafvigelsessummen) er det kriterium, der oftest anvendes til at måle den opnåede overensstemmelse mellem data og model

$$RMS_h = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h_{obs,i} - h_{sim,i})^2} \quad (3)$$

Denne norm beregner standardafvigelsen på trykniveauresidualerne, og kan sammenlignes direkte med den estimerede standardafvigelse på observationsdata.

Tilsvarende defineres RMS-værdien for grundvandstilstrømning som

$$RMS_Q = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\frac{Q_{obs,j} - Q_{sim,j}}{Q_{obs,j}} \right)^2} \quad (4)$$

idet den relative fejl igen er anvendt til at karakterisere overensstemmelsen mellem observeret og simuleret grundvandstilstrømning ($Q_{obs,j} > 0$).

SE (standard error, goodness of fit eller standardafvigelsen) er et direkte mål for modellens evne til at reproducere de observerede data

$$SE = \sqrt{\frac{1}{n + m - P} \sum_{i=1}^{n+m} \left(\frac{\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}}{s_{obs,i}} \right)^2} \quad (5)$$

hvor ψ er tilstandsvariabelen (trykniveau eller vandføring), $s_{obs,i}$ er standardafvigelsen på observationsdata nr. i (hvormed residualerne vægtes), og P er antallet af kalibreringsparametre. I en regres-

sionsmæssig sammenhæng angiver $n + m - P$ antallet af frihedsgrader. Når samtlige modelfejl er elimineret og kun observationsfejl resterer, vil $SE \rightarrow 1$. SE giver dermed et direkte mål for, hvor godt de observerede værdier (trykniveau og medianminimum under ét) simuleres i forhold til usikkerheden på observationerne.

I tabel 3 er der opført kriterier for hhv. ME, RMS og SE. For ME er specificeret, at der maksimalt må optræde en gennemsnitlig fejl på 5% af den samlede trykniveauvariation indenfor området, ΔH . Mht. RMS skal fejlen være indenfor 10% af ΔH . SE må maksimalt blive 2, hvilket svarer til, at observationerne i gennemsnit simuleres indenfor to standardafvigelser.

Tabel 3 Kvantitative kriterier til kalibreringsresultatet. ΔH er den maksimale trykniveauforskel i modelområdet.

Datatype	ME	RMS	SE
Hydraulisk trykniveau, h	$0.05 \cdot \Delta H$	$0.1 \cdot \Delta H$	2
Grundvandstilstrømning, Q	0.1	0.3	

Foruden de kvantitative krav opstillet ovenfor, skal følgende kvalitative kriterier være opfyldt: (1) De estimerede parametre skal have realistiske værdier. I det efterfølgende afsnit 4 vil fysisk plausible intervaller for kalibreringsparametrene blive opstillet. (2) Residualerne skal have en fornuftigt rumlig fordeling. Selv om kriteriet for ME er opfyldt for området under ét, kan der sagtens være områder, hvor modellen konsekvent simulerer for store eller små værdier.

B.4 UDVÆLGELSE AF KALIBRERINGSPARAMETRE

Den stationære model inkluderer den mættede zone, drænvandsafstrømning samt udveksling med vandlegemer såsom søer og vandløb. De inkluderede parametre er derfor begrænset til den horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevne, vandløbslækagekoefficient samt tidskonstant for drænvandsafstrømning til vandløb og modelrande. Initielt er kun den hydrauliske ledningsevne distribueret. Distribueringen er defineret af den geologiske model, som er tolket vha. fem bjergarter: Smeltevandssand (ss), moræneler (ml), kvartssand (ks), glimmersand (gs) og glimmerler (gl). Den geologiske tolkning er nærmere beskrevet i Christensen et al. (2000), hvor resultaterne af en manuel grovkalibrering af et delområde af Sønderjylland også kan findes.

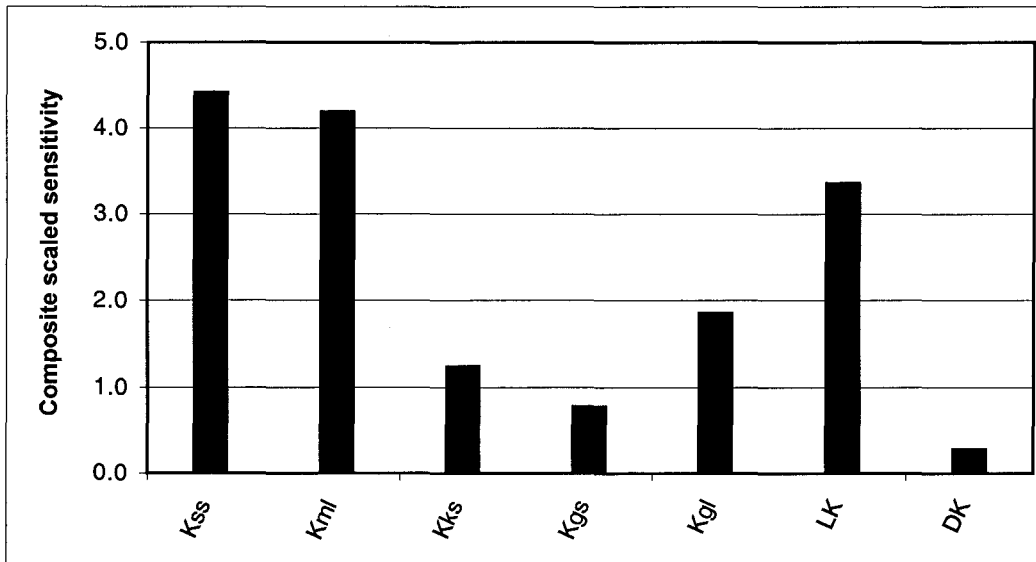
Udvælgelsen af kalibreringsparametre baseres i nærværende sammenhæng på en sensitivitetssanalyse (Hill, 1998), hvor der foruden de fem hydrauliske ledningsevner indgår vandløbslækagekoefficient og drænkoefficient. Ingen af de to sidstnævnte parametre er distribueret. Resultatet af analysen ses i figur 3, hvor den såkaldte "composite scaled sensitivity" for hver parameter er angivet. Composite scaled sensitivity er et mål for, hvor stor indflydelse en parameter har på simuleringen af observationsdata. En høj værdi angiver, at parameteren har stor betydning for simuleringens resultat, og det vil derfor være hensigtsmæssigt at inkludere parameteren i estimationsprocessen.

Det ses af figur 3, at resultaterne er mest sensitive overfor de hydrauliske ledningsevner samt vandløbslækagekoefficienten. Mht. den hydrauliske ledningsevne er sensitivitetsværdien udtryk for den samlede effekt af den horisontale og vertikale ledningsevne, idet de to komponenter er koblet sammen via en anisotropifaktor. Drænkoefficienten har relativt ringe betydning for simuleringen af trykniveaudata og grundvandstilstrømning, hvilket er i overensstemmelse med forudsætningerne for analysen.

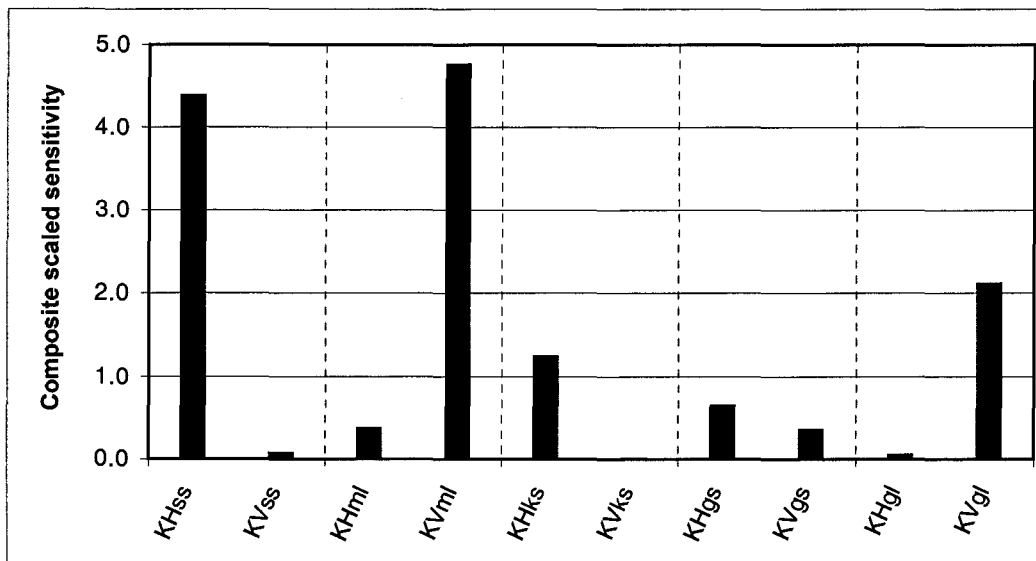
Baseret på resultaterne af sensitivitetssanalysen vælges det at inkludere de fem hydrauliske ledningsevner samt vandløbslækagekoefficienten i kalibrering af modellen.

For at kunne vurdere, hvordan hhv. den horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevne influerer på resultaterne, er der desuden foretaget en sensitivitetssanalyse på hver komponent for de fem geologiske enheder. Resultatet ses af figur 4. Det ses, at betydningen af den horisontale og vertikale ledningsevne er meget forskellig for de fem enheder. For de sandede formationer (smeltevandssand, ss, og kvartssand, ks), er det stort set kun den horisontale ledningsevne, der har betydning,

mens den vertikale ledningsevne er den vigtigste komponent for de lerede formationer (moræner, ml, og glimmerler, gl). Mht. glimmersand (gs) er den horisontale komponent dominerende men den vertikale komponent har også en vis betydning for resultatet. Da det generelt kun er den ene komponent, som har betydning for simuleringens resultat, vælges det at estimere hver ledningsevne samlet (horisontal og vertikal ledningsevne simultant), idet der anvendes en anisotropifaktor (KV/KH) på 0.1 for alle geologiske enheder. Det skal imidlertid pointeres, at det i praksis er den sensitive komponent af den hydrauliske ledningsevne, som estimeres. F.eks. vil den vertikale ledningsevne for smeltevandssandet primært blive bestemt af den horisontale ledningsevne (samt af det specificerede anisotropiforhold) og sekundært af parameterens indflydelse på overensstemmelsen mellem observationsdata og modelresultater.



Figur 3 Beregnet "composite scaled sensitivity" for 7 parametre. K angiver hydraulisk ledningsevne. LK og DK er hhv. lækagekoefficient og drænkoefficient.



Figur 4 Sensitivitetsanalyse af hhv. horisontal (KH) og vertikal (KV) hydraulisk ledningsevne for de fem definerede hydrogeologiske enheder.

De initielle parameterestimater er baseret på grovkalibreringen udført af Christensen et al. (2000). Værdierne er angivet i tabel 4, hvor der også er opført estimater for, hvad der anses som realistiske grænser for de enkelte parametres værdi. De anslåede minimums- og maksimumsværdier for hydraulisk ledningsevne er fastsat på baggrund af Harrar and Henriksen (1996) og PALAE-AUX (1999). Mht. vandløbslækagekoefficienten har der i tidligere modelarbejder, hvor vandudvekslingen mellem grundvandszonen og vandløbene udelukkende beskrives ved lækagekoefficienten (og ikke af egenskaberne for de geologiske lag, der grænser op til vandløbet), været anvendt lækagekoefficienter i området 10^{-10} - 10^{-6} s^{-1} (Dahl et al., 1998). Der er derfor specificeret relativt brede grænser for vandløbslækagekoefficienten.

Tabel 4 *Initielle estimater for kalibreringsparametrene samt vurdering af rimelige minimums- og maksimumsværdier.*

Parameter	Initial værdi	Minimum værdi	Maksimum værdi
Kss (m/s)	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-3}$
Kml (m/s)	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-6}$
Kks (m/s)	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$
Kgs (m/s)	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-4}$
Kgl (m/s)	$1 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-7}$
LK (s^{-1})	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-6}$

B.5 KALIBRERINGSPROCEDURE

B.5.1 Opsætning af stationær model

Da der anvendes en stationær model, har det været nødvendigt at reducere den beregnede nettonedbør betydeligt, da den stationære model ikke inkluderer effekter som overfladevandsafstrømning, interflow og drænvandsafledning som følge af kraftige regnhændelser. Baseret på en analyse af medianminimumsafstrømning for hele Sønderjylland er det fundet, at den årlige nettonedbør skal multipliceres med en faktor 0.3 for at opnå overensstemmelse mellem input til og output fra modellen (grundvandsindvinding samt udstømning til søer, vandløb og havet).

Det er valgt at anvende året 1990 til kalibreringskørslerne. Modellen køres derfor med påvirkninger (nettonedbør samt grundvandsindvinding) svarende til, hvad der i middel er gældende for 1990. Da 1990 i hydrologisk sammenhæng var et relativt gennemsnitligt år, forventes det at repræsentere middeltilstanden i området acceptabelt.

B.5.2 Invers metode

UCODE er baseret på vægtede mindste kvadraters metode, og lokaliseringen af den optimale model foretages vha. en modificeret Gauss-Newton metode. UCODE estimerer kalibreringsparametrene iterativt, med det formål at minimere størrelsen af objektiv funktionen G , der i nærværende sammenhæng kan opskrives som:

$$G = \sum_{i=1}^n \left(\frac{h_{obs,i} - h_{sim,i}}{s_{h,i}} \right)^2 + \sum_{j=1}^m \left(\frac{Q_{obs,j} - Q_{sim,j}}{s_{Q,j}} \right)^2 \quad (6)$$

hvor n er antallet af trykniveauobservationer, $h_{obs,i}$ og $h_{sim,i}$ er hhv. den i 'te observationsværdi og tilsvarende simulerede værdi af trykniveauet, $s_{h,i}$ er standardafvigelsen på den i 'te trykniveauobservation, m er antallet af medianminimumsværdier, $Q_{obs,j}$ er den j 'te medianminimumsværdi og $Q_{sim,j}$ er den tilsvarende simulerede værdi, og $s_{Q,j}$ er standardafvigelsen på den j 'te medianminimumsværdi. Størrelsen af standardafvigelserne s_h og s_Q kan findes i hhv. tabel 1 og 2.

De simulerede trykniveauværdier, $h_{sim,i}$, beregnes ved lineær interpolation mellem de fire nodepunkter nærmest koordinaterne for observationsboringen. Til dette formål benyttes programmet GridGym (Hansen, 1997). Det simulerede flow, $Q_{sim,j}$, beregnes vha. MIKE SHE output retrieval programmet mshe_or, der beregner den samlede grundvandsstrømning til/fra vandløbet opstrøms den aktuelle vandføringsstation (Q-station i MIKE SHE-terminologi).

Det er valgt at afslutte optimeringen, når der er foretaget $N_{it} = 2P$ inverse iterationer, hvor P er antallet af kalibreringsparametre. I praksis har det vist sig, at reduktionen i objektiv funktionens størrelse er minimal, når antallet af iterationer nærmer sig 2P. Da der kan optræde undtagelser fra denne regel, undersøges udviklingen af objektiv funktionen konsekvent, når optimeringen er afsluttet. Hvis G konvergerer asymptotisk mod en konstant værdi, betragtes optimeringsprocessen som værende afsluttet.

Den samlede tid, det kræver at gennemføre en invers simulering, kan vurderes på følgende måde: Der skal foretages P+1 modeleksekveringer pr. invers iteration. MIKE SHE eksekveres derfor i alt $N_{MS} = N_{it}(P+1) + 2P$ gange, hvor de sidste 2P eksekveringer udføres med det formål at beregne bl.a. usikkerhed på de optimerede parametre. Ved anvendelse af eksempelvis 8 kalibreringsparametre skal MIKE SHE eksekveres $N_{MS} = 160$ gange for at fuldføre optimeringen. Da simuleringstiden (ved anvendelse af en almindelig Pentium computer) for det aktuelle modelområde er på mellem 5 og 30 minutter (afhænger af parametrenes værdi), tager det typisk et til to døgn at gennemføre en invers simulering.

Både den hydrauliske ledningsevne og vandløbslækagekoefficienten er log-transformeret, når optimeringen gennemføres. Herved opnås, at alle kalibreringsparametre har samme størrelsesorden til trods for at de fysiske værdier varierer over mange dekader.

B.5.3 Ændringer af kalibreringsmodel

Initielt blev modellen kalibreret med anvendelse af en homogen værdi af lækagekoefficienten for samtlige vandløb. Det var imidlertid ikke muligt at opnå et tilfredsstillende resultat med denne antagelse, og det var derfor nødvendigt at distribuere vandløbslækagekoefficienten. Distribueringen af lækagekoefficienten er baseret på bjergartsfordelingen angivet på jordartskortet for området. Vandløb beliggende i den sydvestlige del af Sønderjylland er generelt lokaliseret i højpermeable sedimenter (smelte- og ferskvandsaflejringer), mens vandløb beliggende i den østlige del (samtlige vandløb som munder ud på den østjyske kyst) og den centrale del af det nordlige modelområde er lokaliseret i lavpermeable materialer (moræneler). Det blev på denne baggrund valgt at arbejde videre med to lækagekoefficienter, én hver for områder karakteriseret ved hhv. sand/grus-sedimenter (LKhøj) og lersedimenter (LKlav).

Randbetingelsen i det nordøstlige hjørne af modelområdet blev under kalibreringsprocessen ændret fra nul-gradient til fastholdt trykniveau. Nul-gradient randen gav anledning til overestimation af trykniveauet tæt på randen, hvilket skyldes, at gradienten på det hydrauliske trykniveau her er rettet ud af modelområdet. Problemet blev afhjulpet ved i stedet at anvende en fastholdt trykrandbetingelse, hvor trykniveauet i randlementerne blev fastlagt ud fra interpolation af trykniveauobservationer fra Jupiter databasen.

B.6 KALIBRERINGSRESULTAT

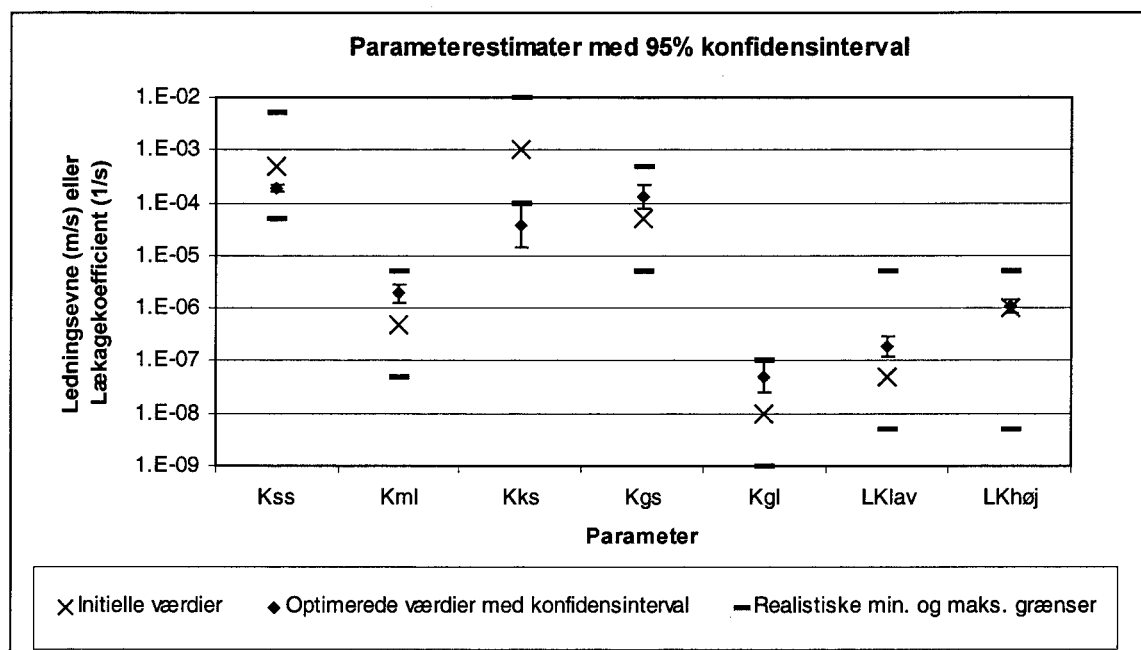
B.6.1 Parameterestimer

Optimeringen af modellen resulterede i parameterestimerne vist i tabel 5, hvor lineære 95%-konfidensintervaller (Hill, 1998) også er opført. De optimerede parametre er generelt behæftet med en relativ lille usikkerhed. Den hydrauliske ledningsevne for kvartssand er dog en undtagelse, idet denne parameter kan variere næsten en dekade indenfor konfidensintervallet. Den relativt store usikkerhed ses illustreret i figur 5, hvor der foruden parameterestimer med tilhørende usikkerhed

også er plottet de initielle parameterverdier og de fysisk plausible grænser for hver parameter (se tabel 4). Igen ses den hydrauliske ledningsevne for kvartssand at afvige fra det generelle billede, idet den estimerede værdi falder udenfor det vurderede realistiske interval. Både det brede konfidensinterval og det lave estimat af ledningsevnen indikerer, at pålideligheden af estimatet for kvartssandets ledningsevne er ringe. Det kan skyldes problemer med parametriseringen, lav model-sensitivitet overfor parameteren, manglende eller fejlbehæftede trykniveauobservationer fra områder, hvor bjergarten optræder, m.m. Der er ikke foretaget en detaljeret analyse af problemet for nærværende.

Tabel 5 Resultater fra den inverse optimering: Parameterestimer, 95% konfidensinterval (K.I.), samt maksimal parameterkorrelation. Enheden for hydraulisk ledningsevne (KH) og lækagekoefficient (LK) er hhv. m/s og s^{-1} .

Parameter nr.	1	2	3	4	5	6	7
Parameternavn	KHss	KHml	KHks	KHgs	KHgl	LKlav	LKhøj
Øvre 95% K.I.	$2.2 \cdot 10^{-4}$	$2.8 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$9.3 \cdot 10^{-8}$	$2.9 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$
Estimat	$1.9 \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-6}$	$3.7 \cdot 10^{-5}$	$1.3 \cdot 10^{-4}$	$4.8 \cdot 10^{-8}$	$1.9 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$
Nedre 95% K.I.	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-5}$	$7.9 \cdot 10^{-5}$	$2.5 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-7}$	$8.3 \cdot 10^{-7}$
Maks. korrelation (med param. nr.)	-0.57 (# 2)	-0.57 (# 1)	-0.51 (# 4)	-0.51 (# 3)	-0.31 (# 2)	-0.14 (# 2)	-0.08 (# 4)



Figur 5 Initielle parameterverdier anvendt i optimeringen, parameterestimer, konfidensintervaller og realistiske grænser for parametrene.

Problemet med urealistiske parameterestimer kan afhjælpes, hvis objektiv funktionen udvides med en såkaldt "penalty function", hvor afgivelsen mellem et a priori estimat af parameteren og optimeringsrutinens parameterestimat adderes til de andre residualer. Det kan imidlertid være vanskeligt at bestemme en hensigtsmæssige a priori værdi (bl.a. pga. skalaeffekter), og samtidig vil denne fremgangsmåde resultere i en dårligere overensstemmelse mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel. Metoden er derfor ikke anvendt i det aktuelle tilfælde.

For de øvrige parametre gælder generelt, at deres værdi ændrer sig i forhold til det initielle estimat, samt at både størrelsen af konfidensintervallet og parameterestimatets absolutte værdi indike-

rer troværdige resultater. Det ses af tabel 5, at den maksimale korrelation mellem to parametre er på -0.57 (mellem den hydrauliske ledningsevne for smeltevandssand og moræneler), hvilket viser, at parameterkorrelation ikke er noget problem for modellen.

B.6.2 Kalibreringsresultat

Optimeringsresultatet målt i overensstemmelse mellem observerede og simulerede værdier af trykniveau og vandføring blev: G (lign. 6) = 1760; SE (lign. 5) = 1.19; $R^2 = 0.92$. Resultatet opfylder kalibreringskriteriet på $SE < 2$, og det overordnede simuleringsresultat er derfor acceptabelt. Det er imidlertid ikke muligt på baggrund af ovenstående mål at vurdere, hvordan hhv. hydraulisk trykniveau og grundvandstilstrømning simuleres. I tabel 6 er overensstemmelsen for de to tilstandsvariable opført. I det efterfølgende foretages en vurdering af de respektive simuleringsresultater, ligesom den rumlige fordeling af residualerne for de to tilstandsvariable er analyseres.

Tabel 6 Overensstemmelse mellem observeret og simuleret trykniveau og grundvandstilstrømning.

Variabel	ME	RMS	ME/ ΔH	RMS/ ΔH
Hydraulisk trykniveau, h	-0.4 m	5.2 m	-0.6%	7%
Grundvandstilstrømning, Q	17%	57%	-	-

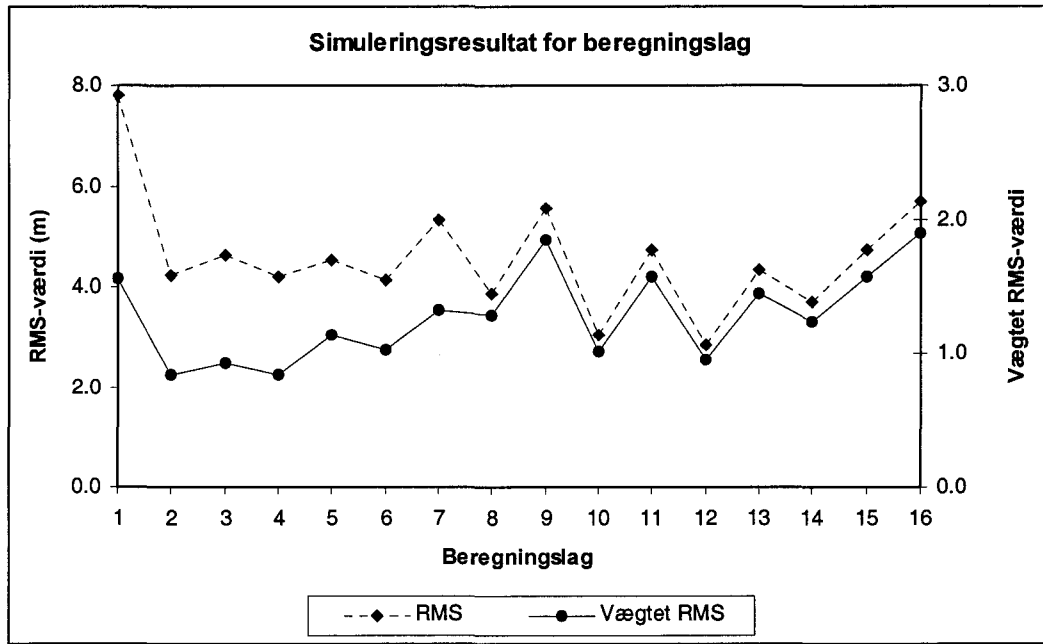
B.6.3 Hydraulisk trykniveau

Kalibreringsresultatet for hhv. hydraulisk trykniveau og grundvandstilstrømning fremgår af tabel 6. Trykniveauet simuleres i gennemsnit en anelse for højt (40 cm), men i forhold til trykniveauvariationen i området ($\Delta H = 70$ m), er den samlede fejl stort set elimineret. Spredningen på det simulerede trykniveau i forhold til det observerede er (udtrykt ved RMS-værdien) på 5.2 m. Da forholdet $RMS/\Delta H$ er på 7% og derved mindre end kalibreringskriteriet på 10%, vurderes præcisionen at være acceptabel.

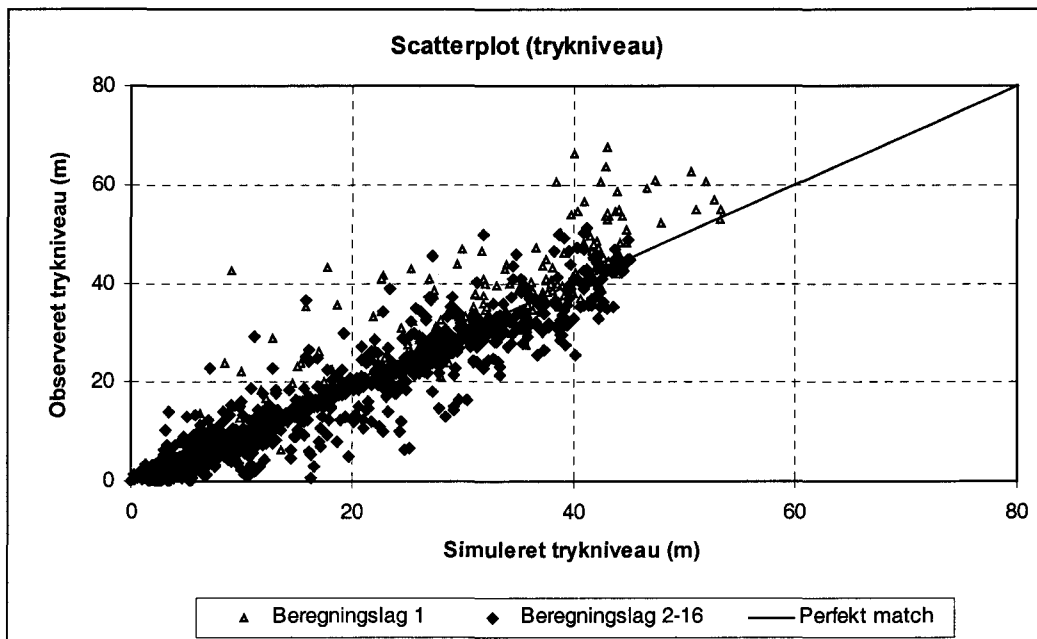
I figur 6 ses hhv. RMS-værdien og RMS-værdien skaleret med standardafvigelsen på trykniveauobservationerne (vægtet RMS-værdi) for hvert af de 16 beregningslag. RMS-værdien for beregningslag 1 skiller sig ud fra de øvrige, idet der her opnås en værdi på næsten 8 m. Denne store spredning skyldes, at beregningslag 1 specielt i den østlige del af Sønderjylland er meget tyk (over 30 m, Christensen et al., 2000). Selv hvis højtliggende sekundære magasiner er beskrevet af den geologiske model, vil det pga. midlingen over den samlede lagtykkelse ikke være muligt at beskrive sådanne magasiner med efterfølgende simulering af for lavt trykniveau. Problemet kan ses på figur 7, der viser observeret mod simuleret trykniveau. Der ses at være en relativ dårlig overensstemmelse for lag 1, hvor trykniveauet generelt underestimeres, specielt for høje trykniveauværdier. For de øvrige beregningslag er både fordelingen af RMS-værdierne (figur 6) og overensstemmelsen mellem simuleret og observeret trykniveau (figur 7) acceptabel.

Hvis de vægtede afgivelser betragtes, fremtræder den dårlige simulering af trykniveauet i beregningslag 1 mindre markant, da trykniveauobservationerne i lag 1 er tillagt en relativ stor usikkerhed (se tabel 1). Både de vægtede RMS-værdier (figur 6) og de vægtede residualer (figur 8) udviser en forholdsvis pæn fordeling som funktion af hhv. beregningslag og simuleret trykniveau. Residualerne i figur 8 ses at fordele sig ligeligt omkring 0.0, og deres størrelse er uafhængige af det simulerede trykniveau. Desuden ses størstedelen af de vægtede residualer at ligge i intervallet ± 2 og kun få værdier falder udenfor ± 4 . Statistisk set er der derfor ikke grund til at reformulere den anvendte model.

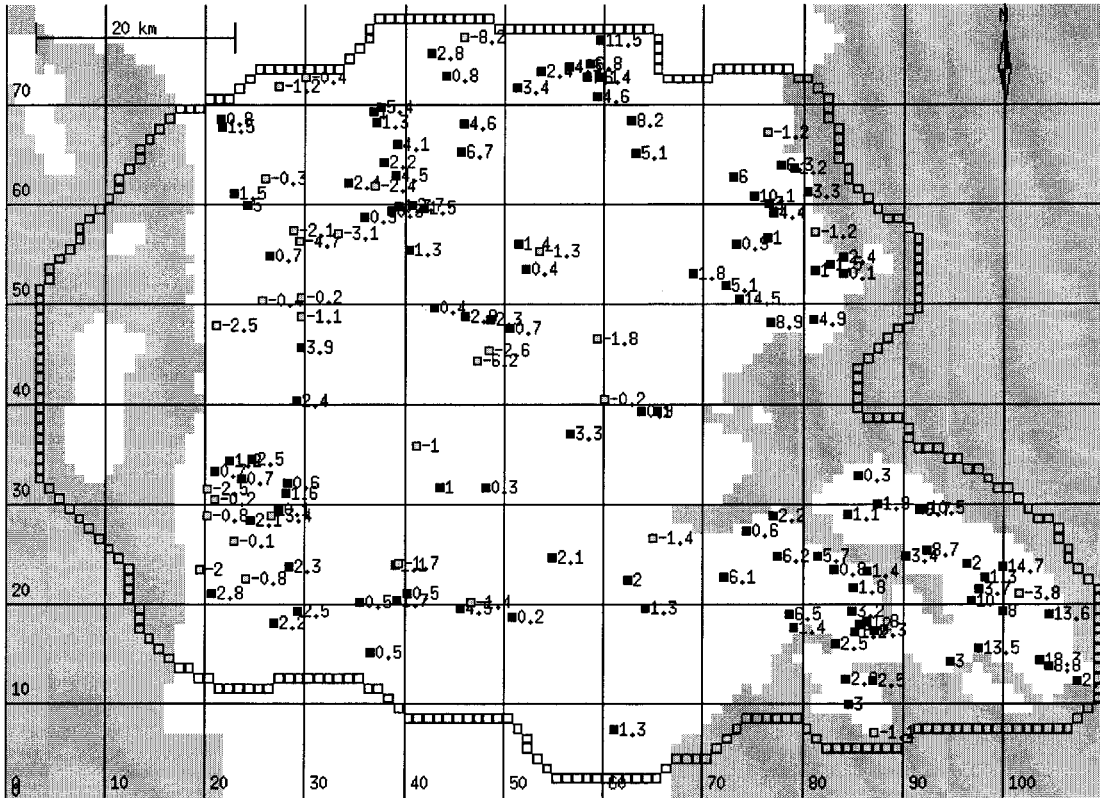
Den rumlige fordeling af residualerne er generelt også rimelig. Som eksempel er residualerne for beregningslag 5 vist i figur 9. I den østligste del af modelområdet (på Als) ses en tendens til systematisk underestimation af trykniveauet, mens der i det øvrige område er en acceptabel fordeling af residualerne.



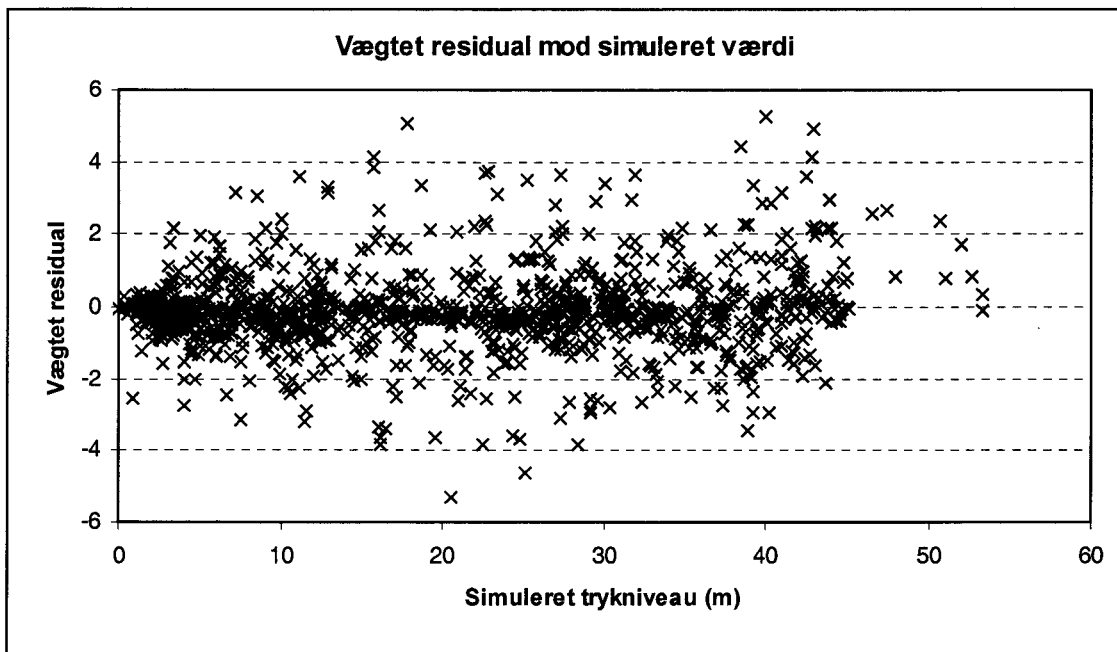
Figur 6 RMS-værdi for de enkelte beregningslag og RMS-værdi normeret med standardafvigelse for det pågældende beregningslag (se tabel 2).



Figur 7 Scatterplot af observeret trykniveau mod simuleret trykniveau.



Figur 8 Residualplot af vægtede afvigelser mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau mod simuleret trykniveau.



Figur 9 Residualer ($h_{obs} - h_{sim}$) i beregningslag 5.

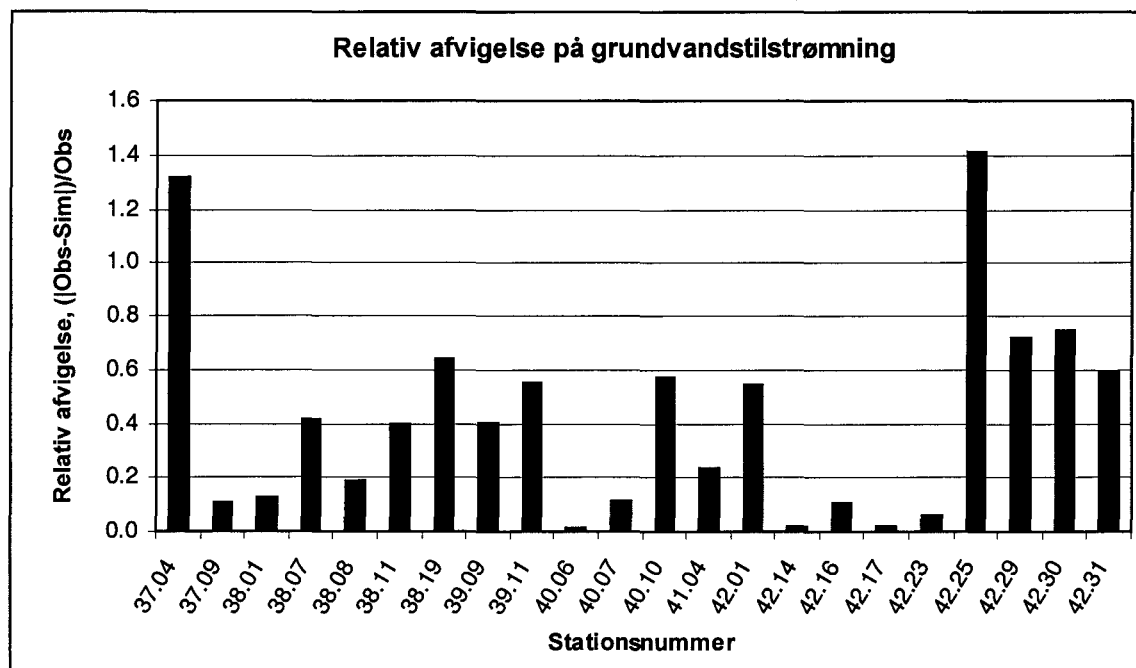
B.6.4 Grundvandstilstrømning til vandløb

Grundvandstilstrømningen til vandløbene underestimeres i gennemsnit 17% (tabel 6) og spredningen på den relative afvigelse mellem observeret og simuleret grundvandstilstrømning er 57%. Dermed er kriteriet for både ME og RMS overskredet med næsten en faktor to. Det kan muligvis skyldes, at der er stillet for skrappe krav til simulering af grundvandstilstrømning. Det er forholdsvis vanskeligt at opstille kvantitative kalibreringskriterier for grundvandstilstrømningen, dels fordi der mangler erfaringsværdier på området, dels fordi medianminimum kan variere over flere deka-der (i nærværende tilfælde fra 35 til 3400 l/s). Der vurderes imidlertid, at de opstillede kalibreringskrav er fysisk realistiske.

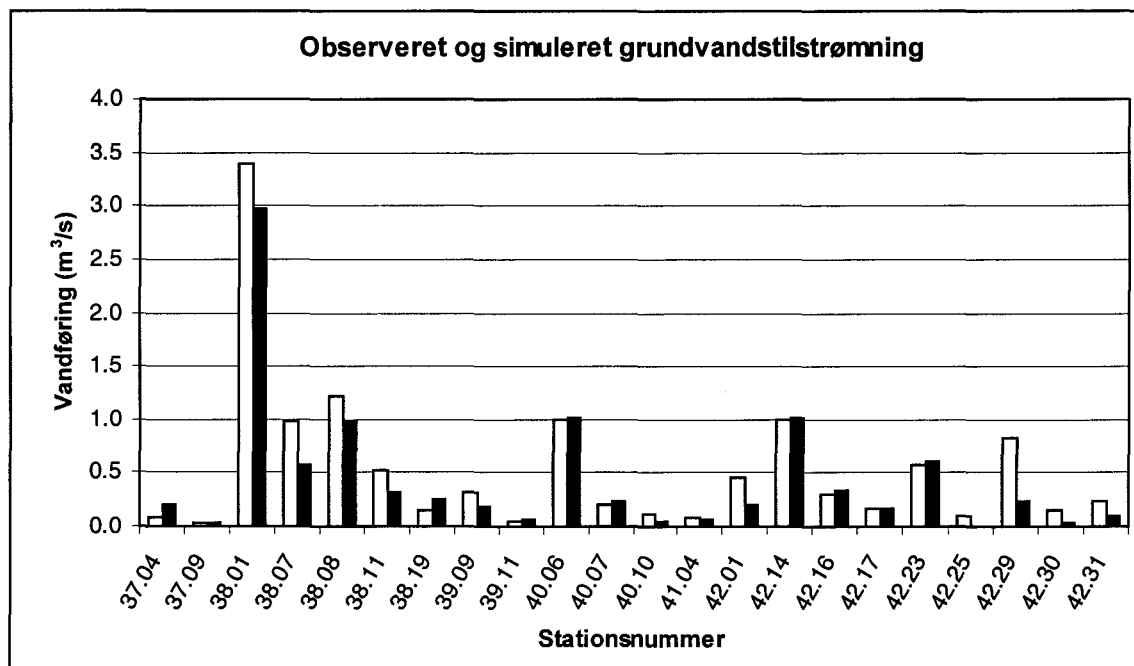
De relativt store ME- og RMS-værdier afspejler til dels, at de 22 medianminimumsværdier udgør en meget lille del af det samlede datasæt på 1243 observationsværdier. Desuden kan optimeringsalgoritmen ikke skelne mellem forskellige datatyper såsom hydraulisk trykniveau og grundvandstilstrømning, og vil derfor søge en løsning, der eksempelvis resulterer i en samlet ME tæt på 0,0, uanset om resultatet indebærer en overestimation af trykniveauet og underestimation af grundvandstilstrømningen (som det er tilfældet her).

Der simuleres generelt for lav grundvandstilstrømning til vandløbene (jf. ME = 17%). For station 42.25 simuleres der desuden en beskeden udstrømning fra vandløbet til grundvandsmagasinet. Begge resultater kan til en vis grad tilskrives simuleringen af for lave trykniveauer i de tilgrænsende magasiner. Som vist i afsnit 6.3 simuleres trykniveauet i beregningslag 1, hvor de fleste vandløb er lokaliseret, relativt dårligt, og det får indflydelse på simulering af grundvandstilstrømningen til vandløbene.

Fordelingen af den relative afvigelse for hver vandføringsstation ses på figur 10. Specielt for station 37.04 og 42.25 optræder der store afvigelser (> 100%). Den observerede vandføring er imidlertid forholdsvis lav for begge stationer, se tabel 2 og figur 11, og det er derfor ikke overraskende, at modellen har svært ved at reproducere grundvandstilstrømningen med høj præcision. For stationerne med størst opland og vandføring (38.01, 38.08, 40.06, 42.14) ses en rimelig overensstemmelse mellem observeret og simuleret grundvandstilstrømning. Modellen er altså i stand til at reproducere den samlede grundvandsstrømning til vandløbene acceptabelt.



Figur 10 Relativ afvigelse på grundvandstilstrømning for de 22 vandføringsstationer, hvor medianminimumsværdier er anvendt i kalibreringen.



Figur 11 Observeret (□) og simuleret (■) grundvandstilstrømning ved de 22 vandføringsstationer.

En mere detaljeret distribuering af vandløbslækagekoefficienten vil sandsynligvis resultere i en bedre simulering af grundvandstilstrømningen. Det er imidlertid usikkert på hvilket grundlag distribueringen i givet fald skal foretages. Det ligger udenfor rammerne af dette arbejde at gennemføre en analyse af den karakter, og der er derfor ikke foretaget en yderligere distribuering af parameteren.

B.7 KONKLUSION

En invers procedure baseret på en stationær version af MIKE SHE og optimeringsprogrammet UCODE er udviklet og afprøvet i forbindelse med kalibrering af DK-model Sønderjylland. Arbejdet viser, at det er muligt at udføre invers kalibrering af den regionale Danmarksmode. Distribuerede fordelinger af hydraulisk ledningsevne og vandløbslækagekoefficient er estimeret på baggrund af observationer af hydraulisk trykniveau og medianminimumsvandføring.

Den inverse kode er først anvendt til identifikation af modelfølsomme parametre, og denne information er benyttet til udvælge parametre, der skal inkluderes i optimeringen (kalibreringsparametre). Efterfølgende er den inverse model anvendt til estimation af kalibreringsparametrene, som bestod af fem hydrauliske ledningsevner og to vandløbslækagekoefficienter.

Den inverse løsning er generelt tilfredsstillende både mht. parameterestimer og simuleringresultater. For seks ud af syv parametre bestemmes der realistiske parameterestimer med relativ lille usikkerhed. Den resulterende overensstemmelse mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau er for størstedelen af grundvandsmagasinerne tilfredsstillende og opfylder de opstillede kalibreringskriterier uden problemer.

Der er identificeret to problemer med den fundne løsning: (1) Estimatet af hydraulisk ledningsevne for en af de definerede geologiske enheder (kvarssand) falder udenfor, hvad der er vurderet som værende et realistisk interval. Desuden er usikkerheden på denne parameter betydelig. (2) Pga. numeriske hensyn er modellens øverste beregningslag stedvist meget tyk, hvilket giver anledning til midling af forskellige geologiske enheders hydrauliske egenskaber. Den dårlige opløsning af de

terrænnære jordlag resulterer efterfølgende i en relativ dårlig overensstemmelse mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau i det øverste beregningslag. Problemet påvirker også simuleringen af grundvandstilstrømning til vandløbene, idet en utilfredsstillende beskrivelse af trykniveauafordelingen i de magasiner, hvor vandløbene er lokaliseret, resulterer i en ringe beskrivelse af grundvandsstrømning til/fra vandløbene. Der er derfor ikke opnået resultater mht. grundvandstilstrømningen til vandløbene som opfylder kalibreringskriterierne. Det vurderes alligevel, at resultatet er acceptabelt på dette trin i udviklingen af modellen, som efterfølgende vil omfatte en manuel ikke-stationær kalibrering af modellen, hvor primært magasinkoefficienter og drænvandskoefficienter skal estimeres.

B.8 REFERENCER

Christensen, B.S.B., Henriksen, H.J., Nyegaard, P. (2000) Status for arbejdet med DK-model Jylland. <http://www.vandmodel.dk/jylland.htm>, GEUS.

Dahl, M., Harrar, W.G., Henriksen, H.J., Knudby, C.J. (1998) Integrated hydrological modelling of freshwater resources in Denmark – Distribution of aquifer-river exchange parameters. In: *Gambling with Groundwater – Physical, Chemical, and Biological Aspects of Aquifer-Stream Relations*, Brahana et al. (eds.), 607-616.

Hansen, M. (1997) GridGym ver. 0.9h, GEUS.

Harrar, W., Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted Å aquifer system: Setup and calibration. Unpublished report. GEUS.

Henriksen, H.J., Knudby, C.J., Rasmussen, P., Nyegaard, P. (1997) National vandressource model. Modelopstilling og kalibrering for Fyn. GEUS undersøgelses rapport 1997/139.

Henriksen, H.J., Trolborg, L., Knudby, C.J., Dahl, M., Nyegaard, P., Jacobsen, P.R., Rasmussen, P. (1998) National vandressource model. Sjælland, Lolland, Falster og Møn. GEUS undersøgelses rapport 1998/109.

Hill, M.C. (1998) Methods and guidelines for effective model calibration. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005, Denver, Colorado, USA.

PALAEAUX (1999), Management of coastal aquifers in europe. Palaeowater, natural controls and human influence, EU fourth framework programme, Final report, June 1999.

Poeter, E.P. and Hill, M.C. (1998) Documentation of UCODE:: A computer code for universal inverse modeling, U.S. Geological survey, Water Resources Investigations Report 98-4080, Denver, Colorado, USA.

Ribe Amt (1994) Afstrømningsmålinger 1993, Ribe Amt, Vandløbskontoret.

Sønderjyllands Amt (1996) Afstrømningsmålinger 1995 i Sønderjyllands Amt, Miljø- og vandløbsvæsenet, Teknisk Forvaltning.