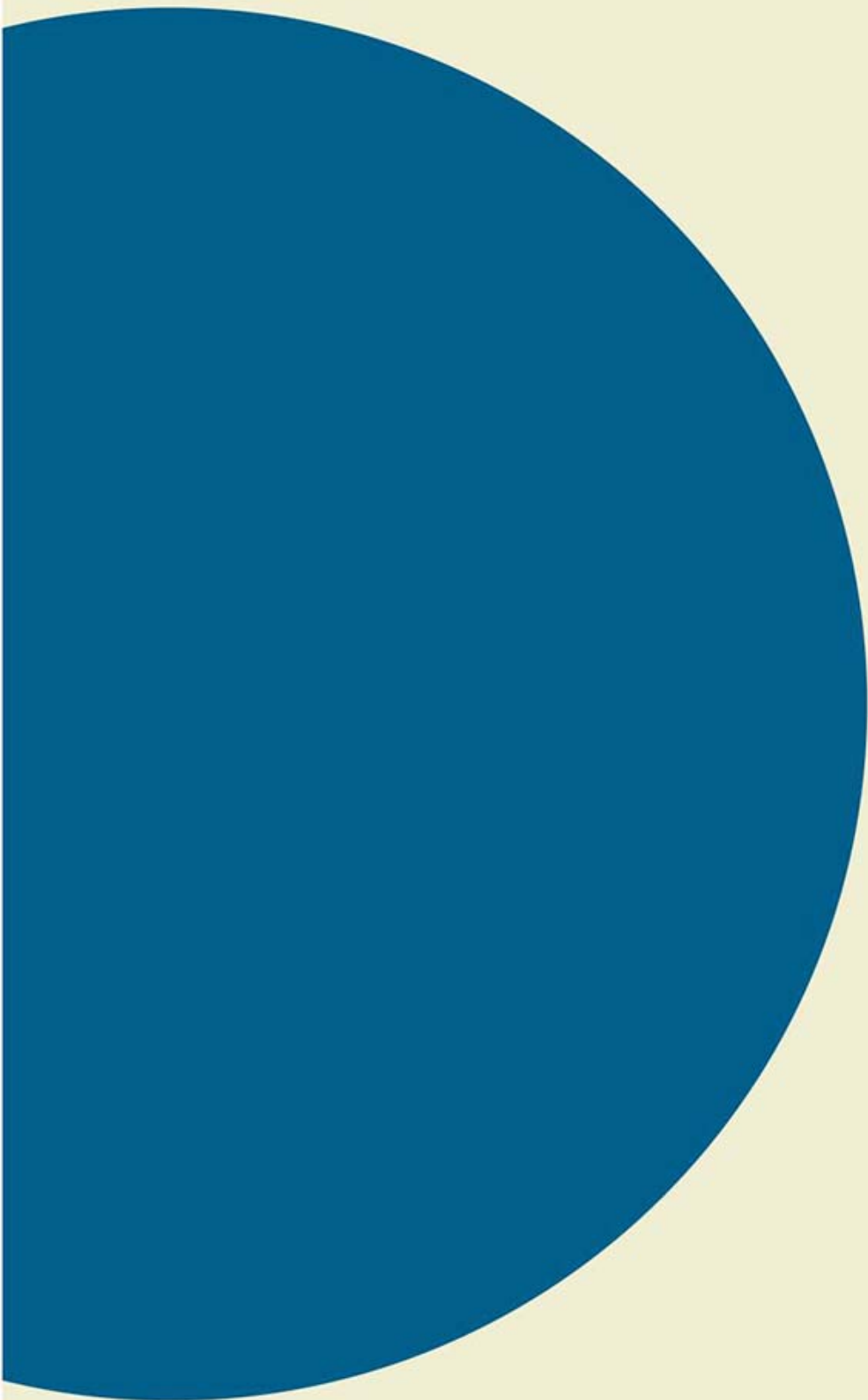


Håndbog i grundvandsmodellering

Torben Obel Sonnenborg & Hans Jørgen Henriksen (eds)



Håndbog i grundvandsmodellering

Torben Obel Sonnenborg & Hans Jørgen Henriksen (eds)

Indholdsfortegnelse

1	Indledning.....	1-1
1.1	Baggrund og formål.....	1-1
1.1.1	Baggrund.....	1-1
1.1.2	Formål og målgruppe.....	1-2
1.2	Terminologi og modelcyklus.....	1-2
1.3	Modelprotokol.....	1-5
1.4	Parter og rollefordeling.....	1-7
1.5	Referencer.....	1-9
2	Formålet med opstilling af model.....	2-1
2.1	Hvordan kan modeller anvendes i forbindelse med zonerings?.....	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
3	Opstilling af geologisk model.....	3-1
3.1	Indledning.....	3-1
3.2	Jordoverfladens topografi og geomorfologi.....	3-2
3.3	Prækvartærets højdeforhold.....	3-2
3.4	Sediment/bjergarts enheder.....	3-2
3.5	Datatyper.....	3-3
3.6	Modeltyper.....	3-4
3.6.1	To- og tre-dimensionelle modeller (traditionelle deterministiske modeller).....	3-4
3.6.2	Overflade modeller (konturerede modeller).....	3-4
3.6.3	Geostatistiske modeller (stokastiske modeller).....	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
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 indrages?.....	4-2
4.4	Fastlæggelse af hydrostratigrafiske enheder.....	4-2
4.5	Fastsættelse af tidsperioder.....	4-3
4.6	Parameterfastsættelse ud fra geologiske informationer og hydrologiske data.....	4-3
4.7	Skaleringseffekter.....	4-4
4.8	Usikkerhed på konceptuel model.....	4-4
4.9	Referencer.....	4-4
5	Matematisk og numerisk grundlag for grundvandsmodellering.....	5-1
5.1	Tre-dimensionale strømningssligning.....	5-1
5.2	To-dimensional strømningssligning.....	5-4
5.3	Forudsætninger for løsning af partielle differentiallyigninger.....	5-5

5.4	Numerisk diskretisering	5-6
5.5	Formulering og løsning af differensligninger	5-9
5.6	Supplerende litteratur.....	5-13
6	Fra hydrogeologisk tolkningsmodel til numerisk grundvandsmodel.....	6-1
6.1	Valg af kode.....	6-1
6.1.1	Procesbeskrivelsen	6-1
6.1.2	Mulighed for partikelbanesimuleringer.....	6-3
6.1.3	Mulighed for automatisk at indbygge hydrogeologiske egenskaber ud fra en rumlig opfattelse af hydrogeologien	6-3
6.1.4	Mulighed for invers modellering samt anden form for automatiseret parameterestimering.....	6-3
6.1.5	Kvalitet af dokumentation, herunder verifikation af koden, manualer og lignende	6-3
6.1.6	Mulighed for erfaringsudveksling med andre brugere, support fra kodeudvikleren.....	6-3
6.1.7	Fremtidsudsigter for koden, herunder hvilken mulighed der er for at skifte til andre koder uden alt for stort tab af arbejdsindsats.....	6-4
6.1.8	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.	6-4
6.1.9	Udbuddet.....	6-4
6.2	Verificering af kode	6-5
6.3	Præprocessering - overførsel af hydrogeologiske parametre til modellen.....	6-5
6.4	Beskrivelse af databehovet i forhold til valgte model og inkluderede procesbeskrivelser	6-9
6.5	Referencer	6-10
7	Fastlæggelse af randbetingelser.....	7-1
7.1	Randbetingelsestyper	7-1
7.1.1	Betydning af valget af randbetingelser.....	7-1
7.1.2	Konstante kontra tidsvarierende randbetingelser	7-3
7.2	Implementering af ydre randbetingelser	7-3
7.3	Implementering af indre randbetingelser(infiltration/ grundvandsdannelse, vandløb, dræn søer/overfladisk afstrømning, oppumpninger).....	7-4
7.3.1	Infiltration	7-4
7.3.2	Vandløb.....	7-4
7.3.3	Dræn.....	7-5
7.3.4	Søer, damme og overfladeafstrømning	7-5
7.3.5	Oppumpninger.....	7-5
7.4	Referencer	7-6
8	Diskretisering af modelområdet i tid og sted.....	8-1
8.1	Diskretiseringstyper	8-1
8.1.1	FD og FE.....	8-1
8.1.2	Ækvidistante eller varierende grid	8-2
8.2	Tidsskridt	8-3
8.2.1	Valg af diskretisering	8-3
8.2.2	Diskretisering i sted.....	8-4
8.2.3	Diskretisering i tid.....	8-4
8.3	Diskretiseringsfejl.....	8-5
8.3.1	Numeriske fejl.....	8-5
8.2.4	Skalaeffekter	8-5
8.4	Hvordan tester man sin diskretisering.....	8-6
8.5	Referencer	8-6

9	Processering af tidsseriedata.....	9-1
9.1	Nedbør, potentiel fordampning og temperatur.....	9-1
9.2	Arealanvendelse, jordtyper, jordfugtighed og aktuel fordampning	9-4
9.3	Vandindvinding.....	9-6
9.4	Trykniveau i form af tidsserier og potentialebilleder.....	9-7
9.5	Afstrømningsdata ved målestationer og synkronmålinger.....	9-7
9.6	Referencer	9-8
10	Dynamisk model.....	10-1
10.1	Indledning	10-1
10.2	Kategorisering af modeltyper.....	10-1
10.3	Inputdata til beregning af grundvandsdannelse	10-4
10.4	Integreret modellering.....	10-10
10.5	Overvejelser om valg af stationær og/eller dynamisk model.....	10-11
10.6	Initialbetingelser og tidsskridt.....	10-14
	tidslig diskretisering.....	10-15
10.7	Referencer	10-16
11	Skalaforhold og heterogenitet.....	11-1
11.1	Indledning	11-1
11.2	Geostatistisk karakterisering af geologiske heterogenitet.....	11-2
11.3	Observationer af geologiske heterogenitet.....	11-4
11.4	Skala-forhold i hydraulisk ledningsevne.....	11-7
11.5	Effektiv hydraulisk ledningsevne.....	11-11
11.6	Effekten af geologisk heterogenitet på trykniveau.....	11-13
11.7	Diskussion og opsummering.....	11-18
11.8	Referencer	11-19
12	Nøjagtighedskriterier	12-1
12.1	Indledning	12-1
12.2	Indledende fastlæggelse af nøjagtighedskriterier i udbudsfasen.....	12-3
12.3	Modelopstilling og observationsdata	12-3
	12.3.1 Typer af observationsdata	12-4
	12.3.2 Målinger af grundvandets trykniveau	12-4
	12.3.3 Datakontrol og processering	12-8
12.4	Usikkerhed på observationsdata	12-9
	12.4.1 Observationer af hydraulisk trykniveau	12-9
	12.4.2 Observationer af vandløbsvandføring.....	12-11
	12.4.3 Anvendelse af usikkerhedsestimater	12-13
12.5	Performance kriterier	12-13
	12.5.1 Typer af kriterier	12-13
	12.5.2 Valg af nøjagtighedskriterier.....	12-16
12.6	Testkørsel og fastlæggelse af kvantitative og kvalitative nøjagtighedskriterier forud for kalibrering.....	12-17
12.7	Referencer	12-20
13	Kalibrering af strømningsmodel	13-1
13.1	Indledning	13-1
13.2	Kalibreringsparametre.....	13-3
	13.2.1 A-priori viden om parametre.....	13-3
	13.2.2 Valg af kalibreringsparametre.....	13-4
13.3	Estimationsteknik.....	13-5
	13.3.1 Entydighed	13-5

13.3.2	Manuel kalibrering ('trial-and-error' estimation).....	13-6
13.3.3	Automatisk kalibrering (invers modellering).....	13-7
13.4	Præsentation af kalibreringsresultat.....	13-8
13.4.1	Beskrivelse af kalibreringsprocessen (kalibreringsjournal).....	13-8
13.4.2	Parameterestimer samt deres usikkerhed.....	13-9
13.4.3	Overensstemmelse mellem observationer og simulering.....	13-9
13.5	Referencer.....	13-13
14	Invers modellering.....	14-1
14.1	Indledning.....	14-1
14.2	Kalibreringskriterium (objektiv funktion).....	14-2
14.2.1	Vægtning indenfor datatyper.....	14-3
14.2.2	Vægtning mellem forskellige datatyper.....	14-4
14.2.3	Brug af a priori information.....	14-6
14.3	Optimeringsalgoritmer.....	14-6
14.3.1	Suffle complex evolution method (sce-metoden).....	14-7
14.3.2	Gradientbaserede metoder.....	14-7
14.4	Entydighedsproblemer.....	14-9
14.5	Parameterusikkerhed.....	14-10
14.6	Eksempel.....	14-12
14.7	Analyse af output fra invers model.....	14-16
14.7.1	Urealistiske parameterestimer.....	14-17
14.8	Evalueret af kalibreringsresultat.....	14-18
14.9	Referencer.....	14-18
15	Validering.....	15-1
15.1	Indledning.....	15-1
15.2	Definition og formål med modelvalidering.....	15-2
15.3	Forskellige typer af valideringstest.....	15-2
15.4	Praktiske aspekter i forbindelse med modelvalidering.....	15-3
15.4.1	Overparameterisering – antal "frie" parametre.....	15-3
15.4.2	Valideringstest ved stationær grundvandsmodel.....	15-4
15.4.3	Begrænsninger i valideret models gyldighedsområde.....	15-5
15.5	Er kravene til modelvalidering urealistiske i praksis?.....	15-5
15.6	Referencer.....	15-6
16	Modellens repræsentativitet.....	16-1
16.1	Indledning.....	16-1
16.2	Modelantagelser.....	16-1
16.2.1	Procesbeskrivelser.....	16-1
16.2.2	Geometriske og geologiske forsimplinger.....	16-2
16.2.3	Randbetingelser.....	16-2
16.3	Modellens troværdighed.....	16-3
16.4	Modelanvendelse.....	16-4
16.4.1	Typer af tilstandsvariable, der kan simuleres.....	16-4
16.4.2	Skala hvorpå modellen arbejder.....	16-4
16.4.3	Hvilken type modellering kan modellen anvendes til?.....	16-5
16.5	Referencer.....	16-5
17	Anvendelse af modellen: vandbalance, grundvandsdannelse og indvindingsoplande.....	17-1
17.1	Indledning.....	17-1
17.2	Grundvandsressourcevurdering og vandbalanceforhold.....	17-2
17.3	Afgrænsning af områder med opadrettede- eller nedadrettede gradienter.....	17-5

17.4 Grundvandsdannelse til øvre magasiner	17-5
17.5 Grundvandsdannelse til dybere magasiner	17-6
17.6 Grundvandsdannende oplande og indvindingsoplande til magasiner og/eller kildepladser/boringer	17-7
17.7 Transporttider og opholdstider i forskellige grundvandsmiljøer	17-8
17.8 Følsomheds- og usikkerhedsanalyser.....	17-9
17.9 Referencer	17-10
18 Partikelbanemodellering og alderssimulering	18-1
18.1 Indledning	18-1
18.2 Infiltrationsområder og indvindingsoplande	18-2
18.2.1 Infiltrationsområde	18-2
18.2.2 Påvirkningsområdet og grundvandsdannende områder	18-2
18.2.3 Karakterisering af infiltrationsområdet	18-5
18.2.4 Indvindingsopland.....	18-6
18.3 Beregning af partikelbaner.....	18-7
18.3.1 Hastighedsinterpolation.....	18-8
18.3.2 Algoritmer til flytning af partikler	18-8
18.4 Partikelbanemodeller	18-9
18.4.1 Mike she partikelbanemodul	18-9
18.4.2 Modpath partikelbanemodul	18-10
18.4.3 Begrænsninger ved numeriske modeller	18-10
18.4.4 Diskussion af partikelbanesimuleringer	18-13
18.5 Grundvandsalder og opholdstidsfordelinger.....	18-14
18.5.1 Metoder til bestemmelse af grundvandets alder.....	18-14
18.5.2 Eksempler.....	18-17
18.5.3 Diskussion af aldersdateringsmetoder.....	18-21
18.6 Referencer	18-22
19 Metoder til usikkerhedsvurdering.....	19-1
19.1 Indledning	19-1
19.2 Definition af usikkerhed	19-2
19.3 Karakterisering af usikkerheden	19-3
19.3.1 Usikkerhedskilde.....	19-3
19.3.2 Niveau af usikkerhed.....	19-4
19.3.3 Usikkerhedens natur.....	19-5
19.4 Usikkerhedskilder	19-5
19.4.1 Konceptuel model	19-5
19.4.2 Model (sted-specifik model)	19-6
19.4.3 Data	19-7
19.4.4 Management scenarier	19-8
19.5 Håndtering af usikkerhed.....	19-8
19.5.1 Elementer i en usikkerhedsvurdering.....	19-8
19.5.2 Identificering og prioritering af usikkerhed	19-9
19.5.3 Kvantificering af usikkerhed.....	19-11
19.5.4 Usikkerhedsstrategi	19-12
19.6 Metoder til vurdering af usikkerhedens betydning	19-14
19.6.1 Fejlphobning	19-15
19.6.2 Monte Carlo	19-15
19.6.3 Generalized likelihood uncertainty estimation methodology, GLUE.....	19-20
19.6.4 MODFLOW2000	19-21
19.6.5 PEST	19-22
19.6.6 T-PROGS	19-23

19.6.7 Følsomhedsanalyse	19-24
19.6.8 Multiple model simulation	19-25
19.6.9 Ekspertvurdering	19-26
19.7 Faldgruber og kritiske problemstillinger.....	19-27
19.8 Referencer	19-28
20 Rapportering af model og resultater	20-1
20.1 Indledning	20-1
20.2 Disposition for standardiseret modelrapport.....	20-2
20.3 Referencer	20-7
21 Vedligeholdelse, opdatering og udbygning af modeller. forfining af model.....	21-1
21.1 Kvalitetsdokument, modelrapport og digital kopi af færdige setupfiler mm. til modeldatabasen (fx cd rom).....	21-1
21.2 Modelarkiv. hvilke grunddata og setupfiler bør man gemme digitalt, med henblik på senere opdatering og udbygning af model?.....	21-2
21.3 Opdatering og udbygning af geologisk model, konceptuel model og numerisk modelopsætning	21-2
21.4 Forfining af model (topografi, indre randbetingelser, arealdata, konceptuel model)	21-2
21.5 Regional model – lokal model	21-3
21.6 Referencer	21-4
22 Modelprogrammer på markedet	22-1
22.1 Valg af de 3D modelkoder (motorer) og grafiske bruger interfaces (skaller) der indgår i sammenligningen	22-1
23 Kvalitetssikring i forbindelse med modelopgaver	23-1
23.1 Indledning	23-1
23.2 Mekanismer til at opnå bedre kvalitet i modellering	23-2
23.2.1 Udbudsbetingelser.....	23-2
23.2.2 Milepæle.....	23-3
23.2.3 Gennemførelse af reviews.....	23-3
23.3 Kvalitetssikringsværktøjet most.....	23-4
23.4 Omkostninger ved kvalitetssikring	23-6
23.5 Referencer	23-6
Appendix A Esbjerg modellen – et eksempel.....	1
A.1 Formålet med opstilling af model	1
A.2 Geologisk model	2
A.3 Konceptuel hydrogeologisk model	3
A.4 Valg af kode.....	6
A.5 Modelopsætning.....	7
A.6 Kalibrering af model	9
A.7 Simuleringer.....	13
A.8 Konklusion.....	19
A.9 Referencer	19
Appendix B Invers kalibrering af dk-model sønderjylland	1
B.1 Indledning	1
B.2 Observationsdata.....	2
B.3 Kalibreringskriterier.....	5
B.4 Udvalgelse af kalibreringsparametre.....	6
B.5 Kalibreringsprocedure.....	8

B.6 Kalibreringsresultat.....	9
B.7 Konklusion.....	15
B.8 Referencer.....	16

Kapitel 1 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 Håndbog i grundvandsmodellering har medarbejdere i de amtslige vandressourceforvaltninger som primær målgruppe. Håndbogen 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.

1.1 BAGGRUND OG FORMÅL

1.1.1 Baggrund

Grundvandsmodeller anvendes i stigende omfang som værktøjer, der kan medvirke til en bedre forståelse og dermed forvaltning af vandressourcen. 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). Sammenlignet med situationen for et par årtier siden, da modellerne endnu var en sag primært for forskningsinstitutioner, er modelanvendelser eksploderet. I takt med den stigende modelanvendelse er der sket en ændring i vores opfattelse af modeller. I starten var mange af os prægede af stor entusiasme omkring de muligheder, der lå i anvendelse af modeller, mens andre primært så de betydelige problemer med at skaffe pålidelige data og fokuserede på begrænsningerne i modellernes troværdighed og anvendelighed i praksis. I dag bliver modeller de facto anvendt dagligt som en helt naturlig del af mange opgaver, og der bliver brugt ganske store ressourcer hertil.

Numeriske modeller har begrænsninger i deres anvendelighed som følge af, at de repræsenterer en forenkling af virkeligheden. Fokus i forskerkredse var i mange år primært 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 medfører imidlertid ikke i sig selv bedre resultater i praktiske anvendelser. Opmærksomheden på nødvendigheden af at dokumentere modelresultater, herunder at beskrive modelbegrænsninger og usikkerheder, er derimod ikke fulgt med i samme takt. Resultatet har været en del frustrationer med modelstudier, som ikke svarede til forventningerne hos vandressourceforvalterne. Det er min opfattelse,

at nogle modelfolk 'oversælger', mens nogle vandressourceforvaltere stadig nærer en betydelig mistillid til modellens praktiske brugbarhed. Skismaet mellem optimisterne og pessimisterne i forhold til nytten af modelanvendelser eksisterer således stadig.

Samtidig eksisterer der en sand forvirring omkring anvendelse af begreber som model, model-system, 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), vandressourceforvaltere (ofte amter) og interessenter (fx vandforsyninger). En forudsætning for at modeller kan anvendes optimalt er, at alle parter udfylder deres rolle optimalt, samt at samspillet fungerer efter klare retningslinier.

1.1.2 *Formål og målgruppe*

Nærværende håndbog i grundvandsmodellering har medarbejdere i de amtslige vandressourceforvaltninger som primær målgruppe. Håndbogen er tænkt som en tjekliste ved rekvirering og opstilling af grundvandsmodeller i forbindelse med detailkortlægning og zonerings. Mere specifikt er formålene med håndbogen 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 til kurser i grundvandsmodellering i forbindelse med zonerings, som GEUS afholder.

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

Håndbogen 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.

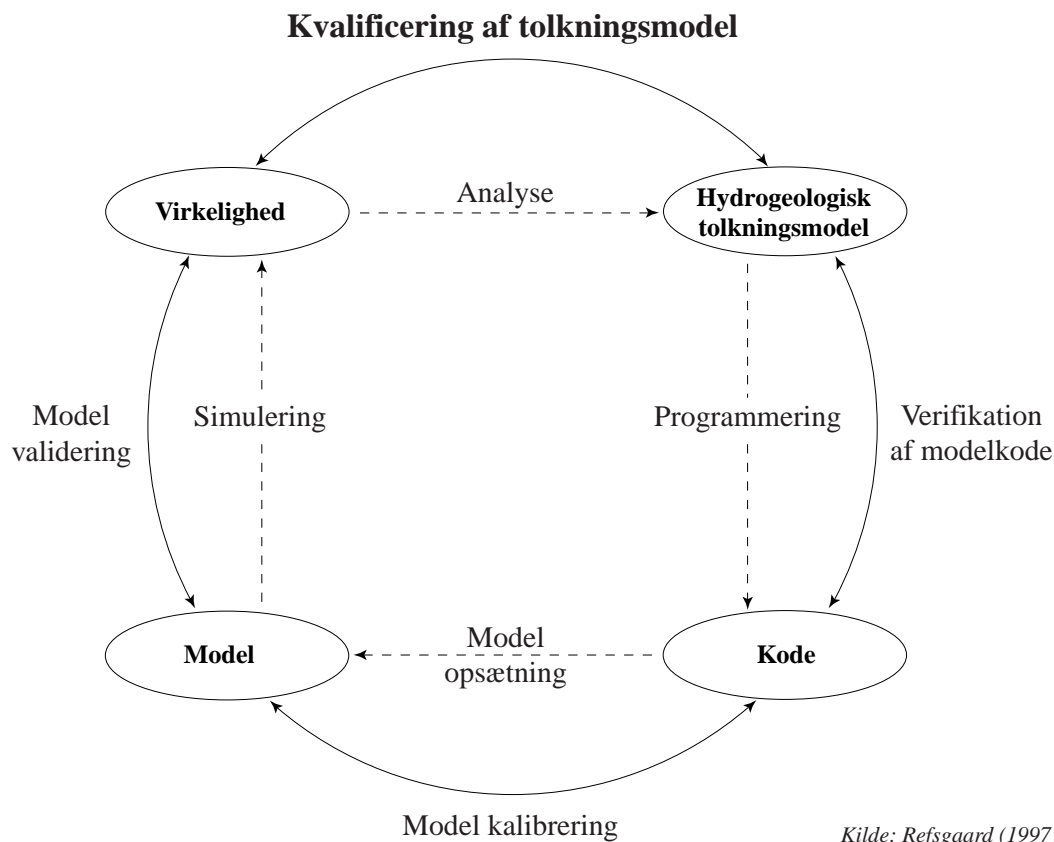
1.2 *TERMINOLOGI OG MODEL CYKLUS*

Definition af en terminologi vil uundgåelig afspejle en metodikopfattelse. Nærværende forslag til terminologi og metodik, som hovedsagelig stammer fra Refsgaard and Henriksen (2004), er udviklet gennem en årrække med inspiration fra bl.a. Schlesinger et al (1979) og Anderson and Woessner (1992). Terminologien i tabel 1.1 er baseret på en idealiseret opfattelse af en modelcyklus som skitseret på figur 1.1, 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 1.1 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 (størrelsesorden 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 magasintal. 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 oppumpninger.
<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.



Figur 1.1 Elementer i modelterminologi og deres indbyrdes sammenhænge

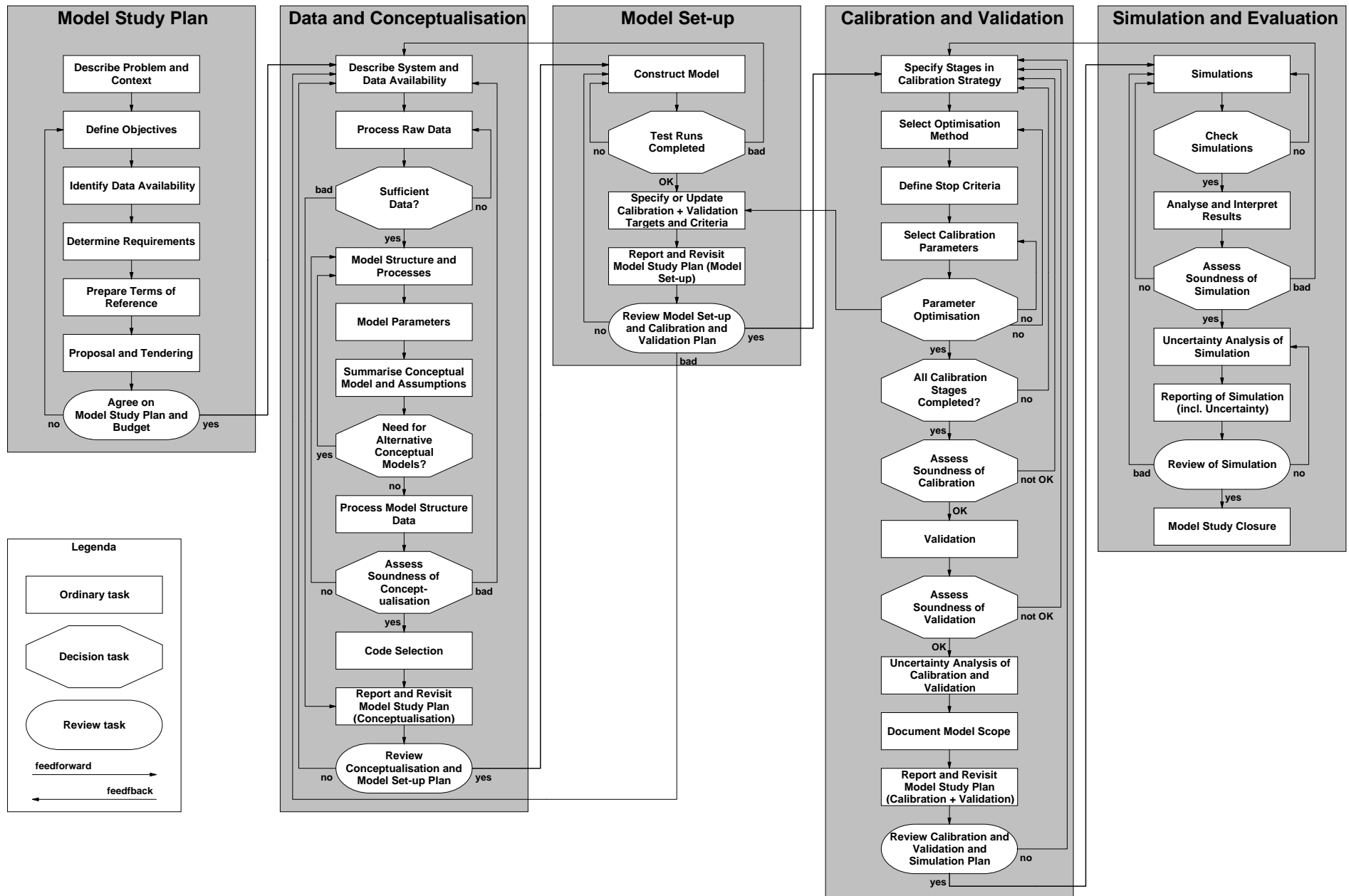
Hvor nogle af de udenlandske synspunkter, som f.eks. Konikow and Bredehoeft (1992) og Oreskes et al. (1994), er meget rigoristiske med fokus på fundamentale videnskabelige problemer, er grundlaget for nærværende forslag et ønske om at opstille en terminologi og et regelsæt, som kan bruges i praksis, 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. Således skelnes der i Refsgaard and Henriksen (2004) fx mellem universel validering og betinget validering. I denne Håndbog anvendes begrebet validering således ikke som universel validering, men som validering betinget af anvendelsesområde og nøjagtighed.

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.

1.3 MODELPROTOKOL

Modelleringsprocessen kan beskrives ved hjælp af en såkaldt modelprotokol, der skitserer de forskellige trin og opgaver i en modelleringsopgave. Modelleringsprotokollen, som er udviklet under EU forskningsprojektet HarmoniQuA er vist på figur 1.2 (Refsgaard et al, 2005). Denne protokol er udarbejdet dels på baggrund af vores erfaringer med grundvandsmodellering i Danmark som afspejlet i Ståbien (Henriksen et al., 2001) og dels udenlandske erfaringer, specielt fra Australien, Holland og Storbritannien. Protokollen i figur 1.2 er på linie med den tidligere protokol i Ståbien, men blot mere detaljeret. Protokollen i figur 1.2 opdeler modelleringsprocessen i fem hovedtrin (steps), som hver er inddelt i et antal opgaver (tasks). Hovedtrinene gennemgår kortfattet i det følgende med referencer til de kapitler i nærværende håndbog, hvor emnet er nærmere beskrevet:

1. I det første trin opstilles en plan for modelleringsarbejdet (*Model Study Plan*). Her skal opgaven afgrænses og formålet og de tilhørende krav til indhold og formål defineres. Det vil ofte ske i samspil mellem vandressourceforvalteren og interessenter. Herefter udvælges en rådgiver til at gennemføre opgaven. Det kan eksempelvis ske gennem udbud, hvor flere rådgiver giver tilbud på baggrund af udbudsbetingelser (Terms of References). Dette trin er afsluttet, når der foreligger en aftale om gennemførelse af opgaven mellem en opdragsgiver (vandressourceforvalter) og en modellør (rådgiver). Formålet med modelopstilling behandles i kapitel 2. Desuden er spørgsmål som nøjagtighedskriterier (kapitel 12) og usikkerhedsvurderinger (kapitel 19) er vigtige elementer i dette trin.
2. I det andet trin (*Data and Conceptualisation*) foretages dataindsamling, - processing og opstilling af hydrogeologisk tolkningsmodel. Opstilling af en hydrogeologisk tolkningsmodel (konceptuel model) omfatter bl.a. 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 håndbogens kapitler 3,4,5,7,8,9,10). På baggrund af den konceptuelle model udvælges herefter en passende modelkode, som er dokumenteret gyldig (verificeret) til beskrivelse af den konceptuelle model (se håndbogens kapitel 22) Hvis en passende modelkode ikke eksisterer, kan det være nødvendigt at udvikle ny kode, som så skal verificeres (se håndbogens kapitel 6).



Figur 1.2 De fem hovedtrin (modellering steps) og samtlige 45 opgaver (tasks) som HarmoniQuA retningslinjerne er opdelt i.

3. I det tredje trin (*Model Set-up*) foretages en model opsætning. Det indebærer at dataene endelig indlæses i det valgte modelprogram og at den første modelkørsel foretages. En del af detaljerne omkring rumlig og tidlig diskretisering, definition af rand- og initialbetingelser mv. som beskrives i Håndbogens kapitler 7-10 understøtter også dette trin. Efter at den første modelkørsel er vel gennemført og laves en endelig fastsættelse *nøjagtighedskriterierne*, som ønskes opfyldt i de efterfølgende kalibrerings- og valideringstrin. Nøjagtighedskriterierne fastlægges oprindeligt under trin 1 som et led i målsætningen, men efter at have indsamlet og arbejdet med data og lavet den første modelkørsel, kan det her vurderes hvor realistiske de oprindelige kriterier er med det til grund liggende datagrundlag. Såfremt nøjagtighedskriterier fastlægges som urealistisk høje, vil det senere være nødvendigt enten at modificere dem eller at indsamle ekstra data (se håndbogens kapitel 12)
4. Trin 4 (*Calibration and Validation*) omhandler model kalibrering og validering. 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 håndbogens kapitler 13 og 14). Model validering foretages ved at gennemføre test som dokumenterer at den givne model (med de kalibrerede parameterværdier) 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 håndbogens kapitel 15. 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 håndbogens kapitler 16 og 19).
5. I det femte trin (*Simulation and Evaluation*) anvendes modellen til at lave de forudsigelser som er det egentlige formål med hele opgaven. 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 usikkerhedsanalyser for at få en fornemmelse af usikkerheden på modelforudsigelserne (se håndbogens kapitel 19). Resultaterne præsenteres oftest i rapporter (se håndbogens kapitel 20). Men andre præsentationsformer såsom animationer og direkte overførsel af dedikerede modeller til slutbrugeren sker også hyppigt. En ekstra mulighed for validering af en sted-specifik model er en såkaldt postaudit (eftervalidering), som udføres flere år efter det egentlige modelstudie, når modellens forudsigelser kan vurderes mod nye feltdata. Postaudit sker i praksis ofte i forbindelse med opfølgende studier.

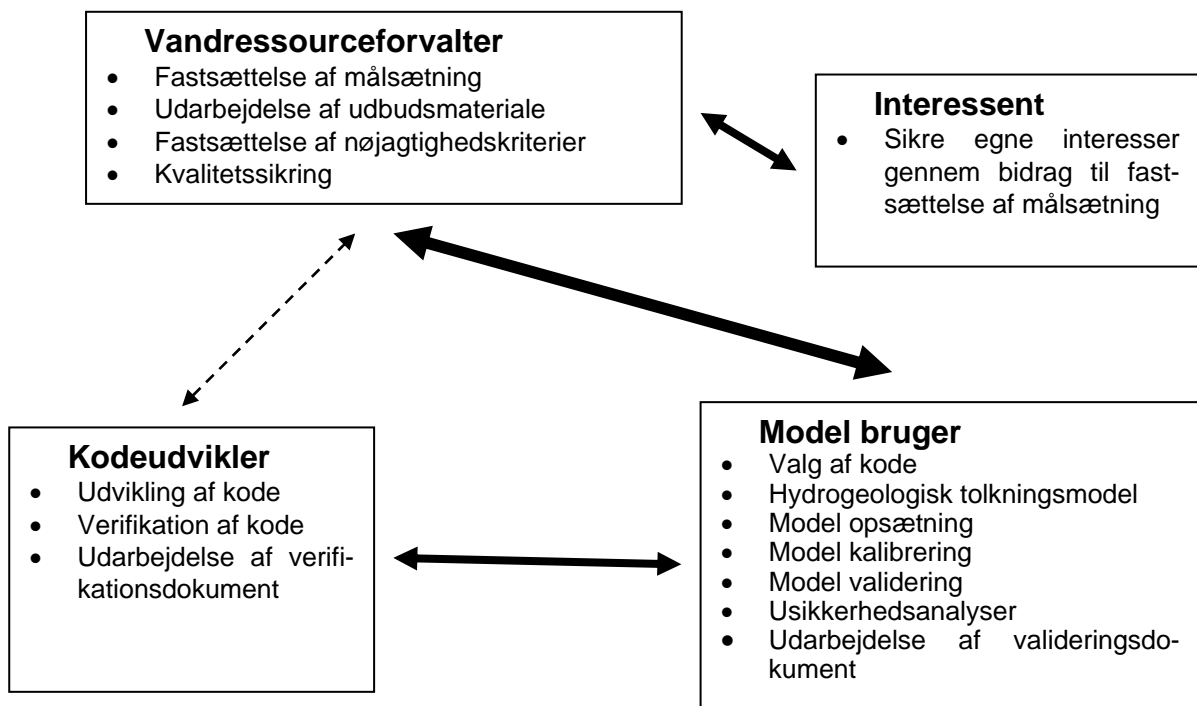
1.4 PARTER OG ROLLEFORDELING

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. Refsgaard et al. (2005) kan den nuværende situation ikke forbedres blot ved en indsats af forskerne. Det kræver en indsats fra alle parter: kodeudviklere (typisk forskere), modelbrugere (typisk rådgivere), vandressourceforvaltere (typisk amter) og interessenter (fx vandforsyninger). De forskellige roller og ansvarsområder for de tre første parter er vist i figur 1.3.

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.



Figur 1.3 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.

Interessentens hovedfunktion er at sikre varetagelsen af egne interesser. Interessenter som eksempelvis vandværker, landboforeninger og grønne organisationer spiller en stadig stigende rolle i forbindelse med vandressourceforvaltningen. En interessent kommunikerer som regel kun med vandressourceforvalteren og kun sjældent direkte med modelbrugeren. Interessenten vil typisk være interesseret i at påvirke målsætningen med en modelleringsopgave, herunder afgrænsningen af hvad modellen skal benyttes til. I situationer, hvor modelresultater kan få stor betydning for en interessent, og hvor en efterfølgende gennemførelse af beslutninger baseret på modelresultater afhænger af interessentens positive medvirken, vil en aktiv involvering af interessenter gennem hele modelleringsopgaven være hensigtsmæssig, fordi interessenten så bedre er i stand til at forstå

modelresultaterne og opnå nogenlunde samme vurdering af deres troværdighed som de øvrige parter.

Det er vigtigt at fremhæve, at de forskellige ansvarsområder, som de tre grupper i figur 1.3 har, er principielle, uafhængigt af hvorvidt de aktuelle personer i en konkret sammenhæng tilhører fire 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.

1.5 REFERENCER

Anderson, M.P. & Woessner, W.W. (1992) The role of postaudit in model validation. *Advances in Water Resources*, 15, 167-173.

Henriksen HJ, Refsgaard JC, Sonnenborg TO, Gravesen P, Brun A, Refsgaard A og Jensen KH (2001) STÅBI i grundvandsmodellering. Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Rapport 2001/56.

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. (1997) Kalibrering, validering – terminologi og metoder. ATV møde “Kalibrering, validering og usikkerheder på grundvandsmodeller”, Schæffergården 28.05.97. ATV Komiteen vedrørende Grundvandsforurening. 1-16.

Refsgaard, J.C., Henriksen, H.J. (2004) Modelling guidelines – terminology and guiding principles. *Advances in Water Resources*, 27(1), 71-82.

Refsgaard, J.C., Henriksen, H.J., Harrar, W.G., Scholten, H., Kassahun, A. (2005) Quality assurance in model based water management – Review of existing practice and outline of new approaches. *Environmental Modelling & Software*, 20, 1201-1215.

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.

Scholten, H., Kassahun, A., Refsgaard, J.C., Kargas, T., Gavardinas, C., Beulens, A.J.M. (2005) A methodology to support multidisciplinary model-based water management. *Environmental Modelling & Software*, accepted.

Kapitel 2 FORMÅLET MED OPSTILLING AF MODEL

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

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

ABSTRACT: Numeriske modeller kan anvendes på forskellige trin i zoneringsprocessen. I forbindelse med zoneringsprocessen 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 modeller 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 zoneringsprocessen, 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 zoneringsproces, 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 zoneringsprocessen 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 (se kapitel 18). 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). Tilsvarende 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 absolutte 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 grundliggende 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 simplere 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 zoneringsvejledningen, 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 zoneringsvejledning, 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 tidslige variation, samt partikelbanesimulering.

Anvendelsen af numeriske grundvandsmodeller i zoneringsvejledningen 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. PEST eller UCODE, se kapitel 14).

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 parameterkombinationer, 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), se kapitel 19. 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 håndbog, 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 indekssværdi), 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/detaillortlægning.

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) Grundvandets 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

Kvartærgeologisk 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/jævnaldrende 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 Tertiær perioden samt marint kvartssand fra Miocæn. De kvartære aflejringer er præget af uregelmæssige aflejringsforhold og påvirkning af istidens gletschere, som har skabt både aflejringsmæssige og strukturelle heterogeniteter. I værste tilfælde ligger ældre lag ovenpå yngre.

3.5 DATATYPER

De geologiske modeller udarbejdes på grundlag af "hårde data": Direkte feltdata 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 både 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. Overfladageofysik 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. boringer 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 er 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.

3.6.2 Overflade modeller (konturerede modeller)

Overflade 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 vigtigt 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 udtegnings 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).

3.6.3 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 & 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 sandsynlige, 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. Data-mængde 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 zoneringsen 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 boringerne kun kan tolkes ud fra kvalificerede vurderinger og ekspertise. I områder med tætliggende boringer 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 boringer og/eller overfladegeofysik. Hvilke

metoder der skal anvendes, afhænger f.eks. af forskelle i aflejringstyper, 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 borerne 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 borer og geofysik, og hvor den alene er konstrueret ud fra en geofysisk tolkning. Det gøres bedst ved at vise boringernes 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 daglokalteter, udgravninger og borer, 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 kornstørrelsesfordelinger, 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 for 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 boringerne (antal undersøgte prøver) og information fra hver prøve (antal undersøgte parametre). Derudover er afstanden mellem boringernes beliggenhed 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. boringer, 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 lagenes/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 boringer/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.dhisoftware.com/mikeshe/Description/GIS_Geo_Editor/index.htm.

Profiltolkning 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 boringer, geofysik mm.). Slice-tolkning giver en række fordele med hensyn til en lettere opdatering 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. Zonerings.

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 numerisk 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 skitsemæssig 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 håndbogens kapitel 7.

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 beskrive 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 årtidsvariationer 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 boksmode 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 densitetseffekter 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 besluttet 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 transmisiviteter.
- 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 moræneler af få meters tykkelse, 2. et forholdsvis lavpermeabelt lag bestående af moræneler og evt. sen- og postglacialt ler, 3. et vandførende lag eller snarere linser af smeltevandssand og grus, som udgør sekundære magasiner, 4. et lavpermeabelt lag bestående hovedsageligt af moræneler 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 moræneler 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 moræneler 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 14). 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 14) og en uafhængig periode til modelvalidering (Kapitel 15). 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 parameterværdier 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 parameterværdier 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 parameterværdier. For det andet vil man ud fra en teoretisk statistisk betragtning nemt kunne overbevise sig om, at estimering af så mange frie parameterværdier med en blot nogenlunde acceptabel statistisk sikkerhed vil være fuldstændig urealistisk, således at modellen måske nok vil kunne bringes til at fitte de eksisterende 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 parameterværdier (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 parameterværdierne 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 beregningselementer.

4.7 SKALERINGSEFFEKTER

En komplicerende faktor ved fastsættelse af parameterverdier direkte ud fra feltdata udgøres af skalaproblemet, se kapitel 11. 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 opskaleringsteknik, 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 14). 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 19).

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. (2000) Afprøvning af zoneringsmetoder, Miljøprojekt 553, Miljøstyrelsen.

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.

Tabel 4.1 Typiske valg af kompleksitetsniveau for den hydrogeologiske tolkningsmodel

	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 boksmode	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 oplandsskala	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

Kapitel 5 MATEMATISK OG NUMERISK GRUNDLAG FOR GRUNDEVANDSMODELLERING

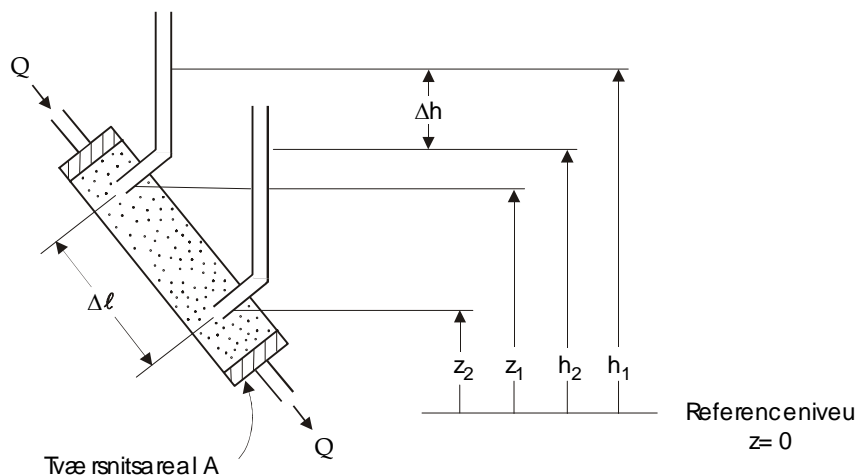
Karsten Høgh Jensen
 Geologisk Institut, Københavns Universitet

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

ABSTRACT: Den styrende differentiaalligning for grundvandsstrømninger udledes ved at kombinere strømningens ligning (Darcy's lov) med massebevarelsesligningen. 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 eksplicitte formuleringer fås en meget simpel løsning, men til gengæld er der restriktioner på tidsskridtet. Implicitte formuleringer fører til 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.

5.1 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 5.1.



Figur 5.1 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):

$$q = \frac{Q}{A} \quad (5.1)$$

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:

$$v = \frac{q}{n} \quad (5.2)$$

hvor n er porøsiteten. Forskellen mellem de to hastighedsbegreber er illustreret i figur 5.2.



Figur 5.2 Illustration af Darcy hastighed og porevandshastighed

Darcy's forsøg (figur 5.1) viste, at filterhastigheden q er proportional med forskellen i hydraulisk trykniveau h_1-h_2 og omvendt proportional med afstanden mellem manometerudtagene Δl 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:

$$q = -K \frac{\Delta h}{\Delta l} \quad (5.3)$$

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

$$q = -K \frac{dh}{dl} \quad (5.4)$$

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 materialeegenskaber 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:

$$K = \frac{k \rho g}{\mu} \quad (5.5)$$

hvor ρ er vandets densitet (kg/m³), μ er viskositeten (kg/ms) og g er tyngdeaccelerationen (m/s²). 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 (5.4) 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:

$$\begin{aligned} q_x &= -K_x \frac{\partial h}{\partial x} \\ q_y &= -K_y \frac{\partial h}{\partial y} \\ q_z &= -K_z \frac{\partial h}{\partial z} \end{aligned} \quad (5.6)$$

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 stedslige 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 (5.6) 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 strømningsproblem skal strømningsligningen (dvs. Darcy's lov) kombineres med massebevarelsesligningen eller kontinuitetsligningen. I den forbindelse er det specifikke magasintal S_s for grundvandsmagasinet en relevant parameter. Det specifikke magasintal 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 magasintal S_s (m^{-1}) kan udregnes som:

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta) \quad (5.7)$$

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 negligable kan bevarelsesligningen eller med disse antagelser kontinuitetsligningen udtrykkes som:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} - Q_p + R \quad (5.8)$$

hvor Q_p angiver fjernet vand (f.eks. ved oppumpning) og R angiver tilført vand (f.eks. som nedsivning). Kombineres strømningsligningen (5.6) og kontinuitetsligningen (5.8) fås den styrende partielle differentilligning for 3-D grundvandsstrømninger:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) - Q_p + R \quad (5.9)$$

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

5.2 TO-DIMENSIONAL 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 grundvandsmagasinets 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 magasineringkapacitet beregnes.

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

$$T = \int_0^d K(z) dz \quad (5.10)$$

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

$$S = \int_0^d S_s dz \quad (5.11)$$

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

$$T = Kd \quad (5.12)$$

og

$$S = S_s d \quad (5.13)$$

Den vertikalt integrerede version af strømningssligning (5.9) for to-dimensionale strømninger i artesiske grundvandsmagasiner har følgende udseende:

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) - Q_p + R \quad (5.14)$$

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 differentialligning for horisontale strømninger:

$$S_y \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right) - Q_p + R \quad (5.15)$$

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 Kh . 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 (5.14) er inkluderet i alle to-dimensionale numeriske grundvandsmodeller, og i de fleste modeller er det desuden muligt at foretage beregninger på grundlag af ligning (5.15). 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.

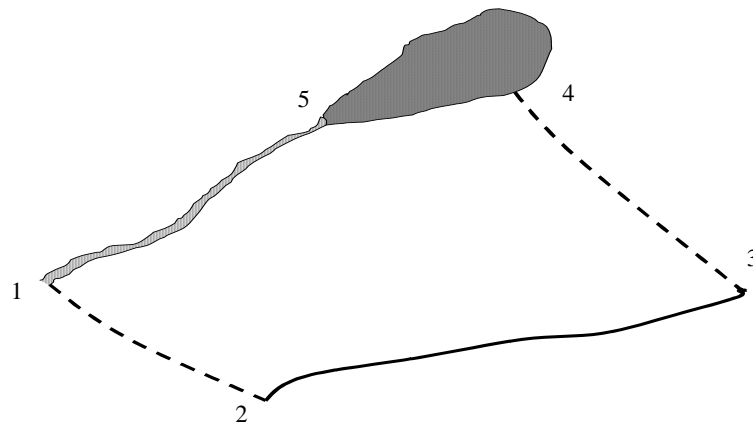
5.3 FORUDSÆTNINGER FOR LØSNING AF PARTIELLE DIFFERENTIALLIGNINGER

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): trykniveauafhængig 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 5.3 er vist et eksempel på anvendelse af de forskellige typer af randbetingelser:



Figur 5.3 Illustration af forskellige typer randbetingelser for en planmodel af et grundvandsmagasin

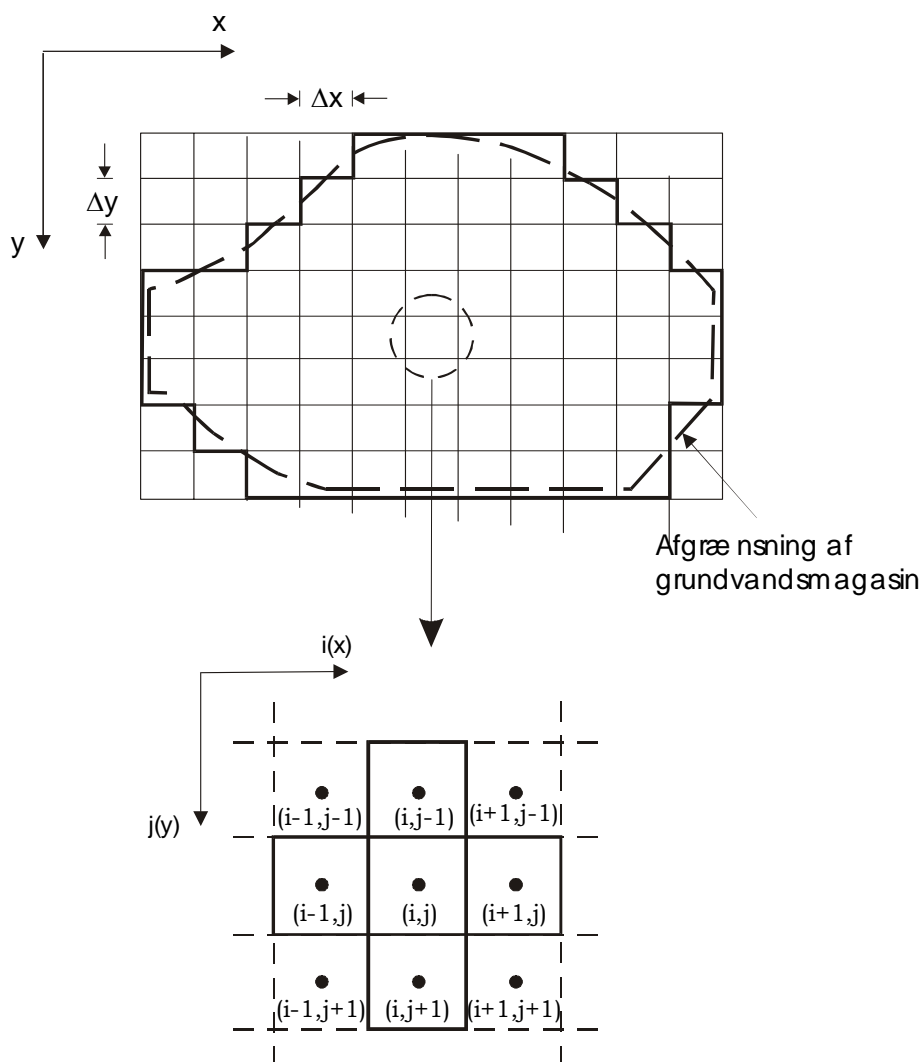
- 1-2: strømlinie (type 2: 0-flux)
- 2-3: grundvandsskel (type 2: 0-flux)
- 3-4: strømlinie (type 2: 0-flux)
- 4-5: sø (type 1: specificeret trykniveau)
- 5-1: vandløb (type 3)

5.4 NUMERISK DISKRETISERING

De klassiske metoder til diskretisering af differentialligninger er "finite difference" og "finite element" metoderne, hvor førstnævnte er den mest udbredte indenfor grundvandsmodellering. Begge metoder indebærer, at den partielle differentialligning erstattes af et sæt af differensligninger baseret på en diskretisering i sted og tid. Metoderne rummer hver deres fordele og ulemper. "Finite element" metoden har bl.a. den fordel, at der kan foretages en meget fleksibel stedlig 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.

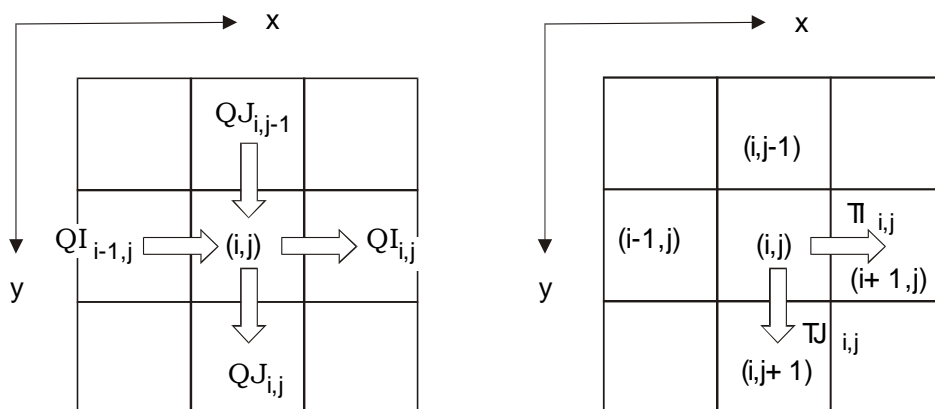
Enhver anvendelse af en numerisk grundvandsmodel indebærer, at der skal foretages en diskretisering af grundvandsmagasinet ved at foretage en opdeling i et antal beregningslementer som illustreret i figur 5.4. I x-aksens retning benyttes index i og i y-retningen index j , således at et bestemt element er karakteriseret ved koordinaten (i,j) . Antallet af elementer i de to retninger betegnes ved NX og NY . 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 . Tidsskridtet Δt kan varieres afhængig af hvor hurtigt trykændringer forplanter sig.

For at udvikle den diskretiserede form af den styrende differentialligning 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).



Figur 5.4. Diskretisering af et grundvandsmagasin med kvadratiske elementer

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 5.5. Figuren angiver den fortegnskonventionen, som anvendes for strømmingen og transmissiviteten mellem nabo celler.



Figur 5.5 Fortegnskonvention 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 strømningsbidrag samt bidrag for oppumpning (Q) og nedsivning (R), kan der opstilles følgende vandbalance:

$$(h_{i,j}(t + \Delta t) - h_{i,j}(t))S_{i,j}\Delta x\Delta y = (QI_{i-1,j} + QJ_{i,j-1} - QI_{i,j} - QJ_{i,j} - Q + R)\Delta t \quad (5.16)$$

De fire horisontale vandfluxe kan formuleres på diskret form som:

$$\begin{aligned} QI_{i-1,j} &= \Delta y TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta x} \\ QJ_{i,j-1} &= \Delta x TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta y} \\ QI_{i,j} &= \Delta y TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i+1,j}(t')}{\Delta x} \\ QJ_{i,j} &= \Delta x TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i,j+1}(t')}{\Delta y} \end{aligned} \quad (5.17)$$

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

$$TI_{i,j} = \frac{T_{i,j} + T_{i+1,j}}{2} \quad (5.18)$$

eller et harmonisk gennemsnit

$$TI_{i,j} = \frac{2T_{i,j}T_{i+1,j}}{T_{i,j} + T_{i+1,j}} \quad (5.19)$$

Det harmoniske gennemsnit svarer til en seriemodstand, hvilket er i overensstemmelse med, at vandet først skal strømme gennem et område med en transmissivitetsværdi 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.

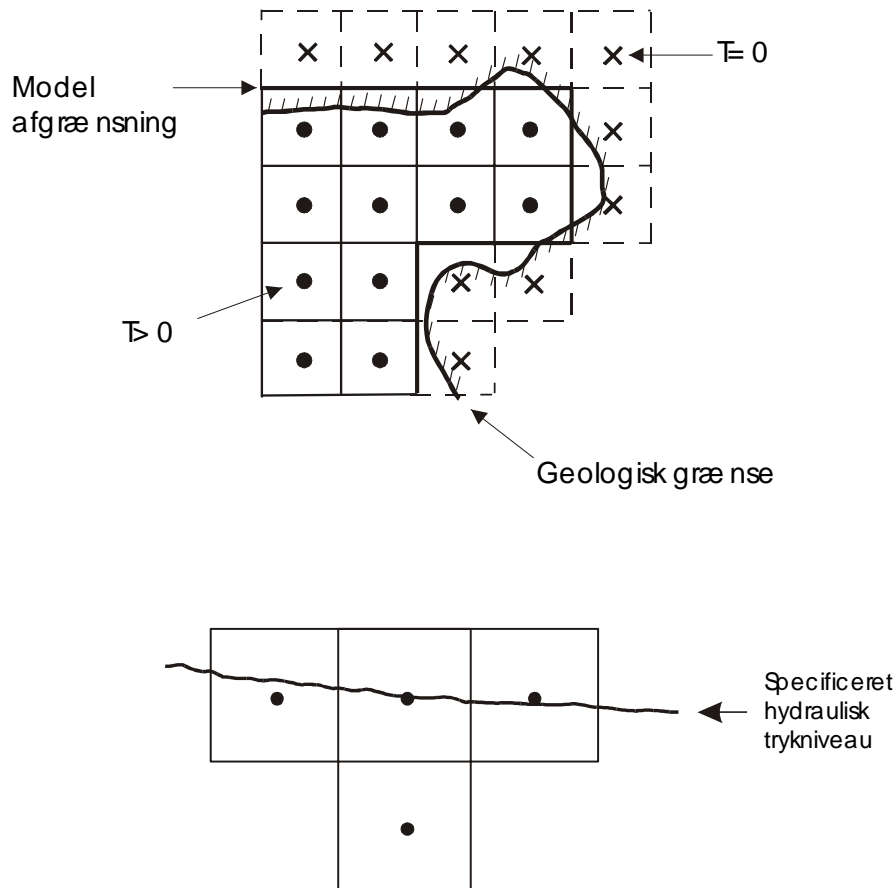
Kombineres strømningsligningerne for de fire vandudvekslinger med nabocellerne ligning (5.17) med kontinuitetsligningen ligning (5.16) fås følgende ligning:

$$\begin{aligned} S_{i,j} \frac{(h_{i,j}(t + \Delta t) - h_{i,j}(t))}{\Delta t} &= TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta x^2} + TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta y^2} \\ &\quad - TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i+1,j}(t')}{\Delta x^2} - TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i,j+1}(t')}{\Delta y^2} - Q + R \end{aligned} \quad (5.20)$$

En sådan differensligning kan opskrives for alle celler i modelområdet, hvilket fører til i alt $NX*NY$ 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 (5.19). 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 5.6. Flux betingelser med værdier forskellig fra 0 indbygges i modellen via Q og R leddene i ligning (5.20). Ved specificerede hydrauliske trykniveauer udelades differensligningen for denne celle af beregningerne og erstattes med de angivne værdier

$$h_{i,j} = f(t) \tag{5.21}$$

jvnf. figur 5.6.



Figur 5.6 Indbygning af randbetingelser i den numeriske formulering

5.5 FORMULERING OG LØSNING AF DIFFERENSLIGNINGER

Når randbetingelserne er indbygget i ligningerne er næste trin at løse det sammenhørende sæt af $NX*NY$ differensligninger. Før dette kan ske skal værdien for t' i ligning (5.20) 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 (5.17) til beregning af Darcy fluxen, udregnes som et vægtet gennemsnit af $h(t)$ og $h(t+\Delta t)$:

$$h_{i,j}(t') = (1 - \theta)h_{i,j}(t) + \theta h_{i,j}(t + \Delta t) \quad (5.22)$$

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 (5.20) fås følgende differensligning:

$$h_{i,j}(t + \Delta t) = h_{i,j}(t) + \frac{\Delta t}{S_{i,j}} \left(TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t) - h_{i,j}(t)}{\Delta x^2} + TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t) - h_{i,j}(t)}{\Delta y^2} - TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t) - h_{i+1,j}(t)}{\Delta x^2} - TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t) - h_{i,j+1}(t)}{\Delta y^2} - Q + R \right) \quad (5.23)$$

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:

$$\frac{T}{S} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) \leq \frac{1}{2} \quad (5.24)$$

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.

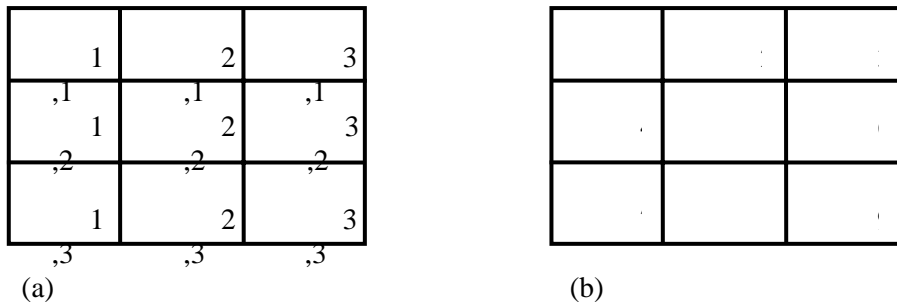
Implicit løsning

Hvis $\theta=1$ fås følgende formulering af differensligningen (5.20):

$$\begin{aligned}
 & h_{i-1,j}(t + \Delta t) \frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} + h_{i,j-1}(t + \Delta t) \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \\
 & h_{i,j}(t + \Delta t) \left(-\frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} - \frac{S_{i,j}}{\Delta t} \right) + \\
 & h_{i+1,j}(t + \Delta t) \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} + h_{i,j+1}(t + \Delta t) \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} = -Q + R - S_{i,j}h_{i,j}(t)\Delta t
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

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 tidskridt, 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 simpelt system bestående af 3x3 beregningspunkter, figur 5.7.



Figur 5.7 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 5.7a) 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 5.7b). Med denne notation kan ligning (5.25) opskrives på følgende måde

$$\sum_{l=1}^N a_{kl} h_l(t + \Delta t) = b_k \quad (k = 1, \dots, N) \tag{5.26}$$

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

$$[A]\{h\} = \{b\} \tag{5.27}$$

Elementerne i denne matrice udregnes som

$$\begin{aligned}
 a_{kk} &= -\frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} - \frac{S_{i,j}}{\Delta t} \\
 a_{k,k+1} &= \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} & a_{k,k-1} &= \frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} \\
 a_{k,k-NX} &= \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} & a_{k,k+NX} &= \frac{TJ_{i,j+1}}{\Delta y^2}
 \end{aligned}
 \tag{5.28}$$

For en 3x3 model har matricen følgende udseende

$$\begin{pmatrix}
 x & x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 x & x & x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\
 x & 0 & 0 & x & x & 0 & x & 0 & 0 \\
 0 & x & 0 & x & x & x & 0 & x & 0 \\
 0 & 0 & x & 0 & x & x & 0 & 0 & x \\
 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & x & x & x \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & x & x
 \end{pmatrix}
 \tag{5.29}$$

'x' angiver et element forskellig fra 0. Det fremgår af ligning (5.29) 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 koder 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 koder er der mulighed for at vælge blandt nogle få udvalgte ligningsløserne. 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 koden 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.

5.6 SUPPLERENDE LITTERATUR

Anderson, M.P. and W.W. Woessner, *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., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T.Vetterling, *Numerical recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.

Kapitel 6 FRA HYDROGEOLOGISK TOLKNINGSMODEL TIL NUMERISK GRUNDEVANDSMODEL

Adam Brun
IHA – Ingeniørhøjskolen i Århus

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.

6.1 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.

6.1.1 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 zoneringsarbejde er det i første omgang valgt at fokusere på en tre-dimensional 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 tidslige 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 koder 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 7. To koder, MIKE SHE og MODBRANCH, har ud over denne udvekslingsbeskrivelse mulighed for at inkludere en dynamisk beskrivelse af strømningen i vandløbet, fuldt 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.

6.1.2 *Mulighed for partikelbanesimuleringer*

Stort set alle koder har mulighed for partikelbanesimuleringer efterfølgende flowberegningen.

6.1.3 *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 den 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 parameterverdier i de enkelte celler i den numeriske model. Denne præprocessering behandles separat i et senere afsnit.

6.1.4 *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 erfaringsverdier 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 parameterverdierne og gentage simuleringen, dette gøres trinvist, 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.

6.1.5 *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.

6.1.6 *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.

6.1.7 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.

6.1.8 Hvordan er det at arbejde med, hvordan er mulighederne for at automatisere trivielle opgaver, såsom opdatering af hydrogeologien, plotting 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.

6.1.9 Udbuddet

Udbuddet af grundvandsmodeller er stort. Tabel 6.1 beskriver en overordnet inddeling af koderne ud fra deres kobling af grundvandsstrømning med umættet zone og vandløb.

Tabel 6.1 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 kørbare 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, sensitivitetsanalyser 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 er 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 kørbare 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 tidskridtene ændres fra dage til minutter, ligeledes vil det kræve en finere stedlig diskretisering. Disse forhold vil resul-

tere 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).

6.2 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.

6.3 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 6.1, øverst.

Der findes koder til denne proces, et dansk produkt GeoEditor kan således direkte fra boringsdatabasen 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 6.1, 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.

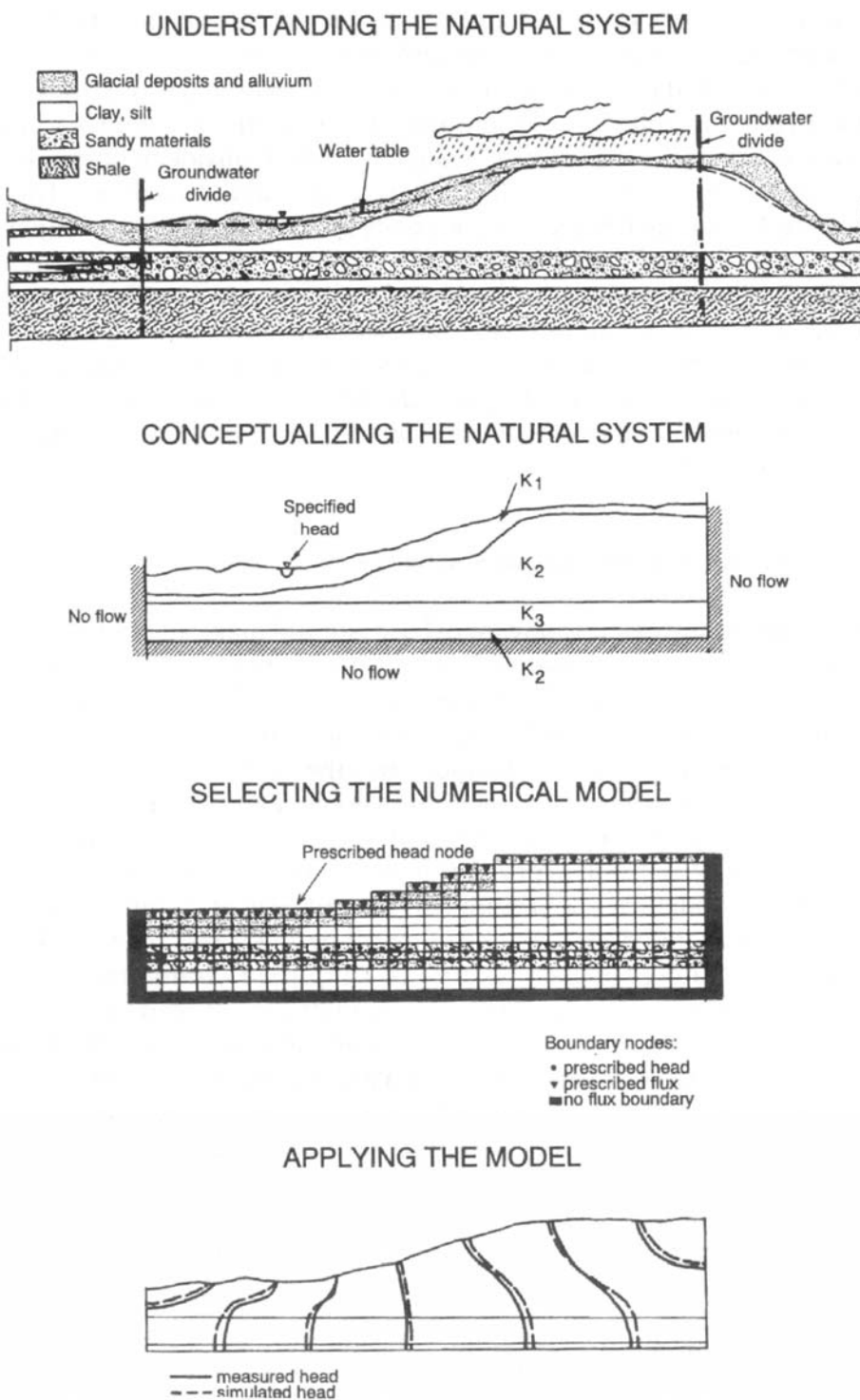
Alternativet er den gridbaserede metode. Her opstiller man først sine beregningslag for dernæst at indbygge de hydrogeologiske parametre i selve beregningscellerne. Denne metodik er faciliteret af stort set alle koder. Der er hjælpeværktøjer til at lade beregningslagene følge de geologiske laggrænser, indbygge linser osv. Processen kan sammenlignes lidt med at tegne af med et kalke-ringsparpir lagt oven på den fysiske model. Det u hensigtsmæssige 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 at korrigere 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.



Figur 6.1 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 6.2 er et udvalg af præprocessorer beskrevet, de understøtter alle partikelbanesimuleringer (dog ikke ArgusOne).

Tabel 6.2 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 inverts 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 inverts modellering.	MODFLOW-96
Groundwater-Vistas/MS-VMS	Gridmetode med 2D baseret editor (3D med MS-VMS), jordtyper som mulighed. Mulighed for inverts 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 modellering" 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.dhissoftware.com/mikeshe. Prisen på produkterne ligger i intervallet 10.000 til 40.000 kr. for en pakke, der indeholder 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.

6.4 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 tredimensional 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 informationer om hydraulisk ledningsevne været angivet for en pumpe-test 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 pumpe-testen. Tilsvarende kan modellen håndtere en tidlig opløsning på helt ned til time niveau, hvor potentiale data typisk findes som måneds værdier. 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 6.3 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 6.3 Eksemplificering af databehov ved skift fra simpel til avanceret procesbeskrivelse

Type	Beskrivelse	
	Simpel	Avanceret
Grundvandszonen	Rumlige fordeling af hydraulisk ledningsevne, magasintal, trykniveau, placering samt tidlig variation i indvindinger	+ sprækkegeometri, lagorientering, principiel retning af hydraulisk ledningsevne
Umættet zone	Fordeling i tid og sted af perkolation, evt. beregnet med rodzonemodell	+ 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.

6.5 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 7 FASTLÆGGELSE AF RANDBETINGELSER

Adam Brun

IHA – Ingeniørhøjskolen i Århus

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 parametriseringen af randbetingelserne bør derfor indgå som en væsentlig faktor ved opstilling af modellen.

7.1 RANDBETINGELSESTYPER

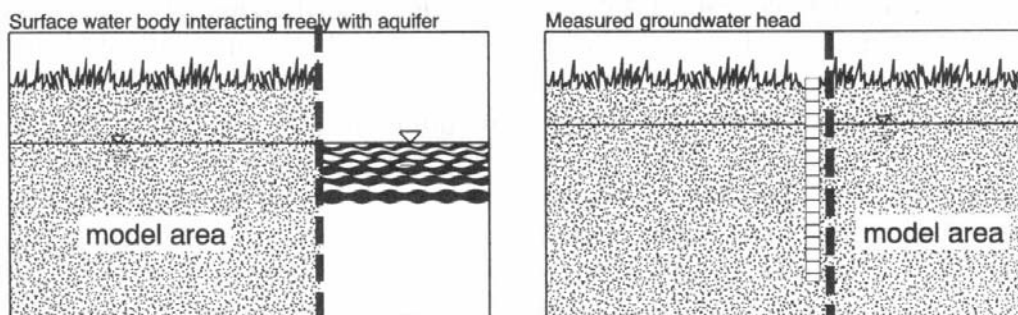
Randbetingelser er på baggrund af deres matematiske formulering inddelt i tre kategorier, se figur 7.1 for illustration af de forskellige typer.

- 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 idet den jo angiver variabel-værdien direkte, omvendt er det 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.

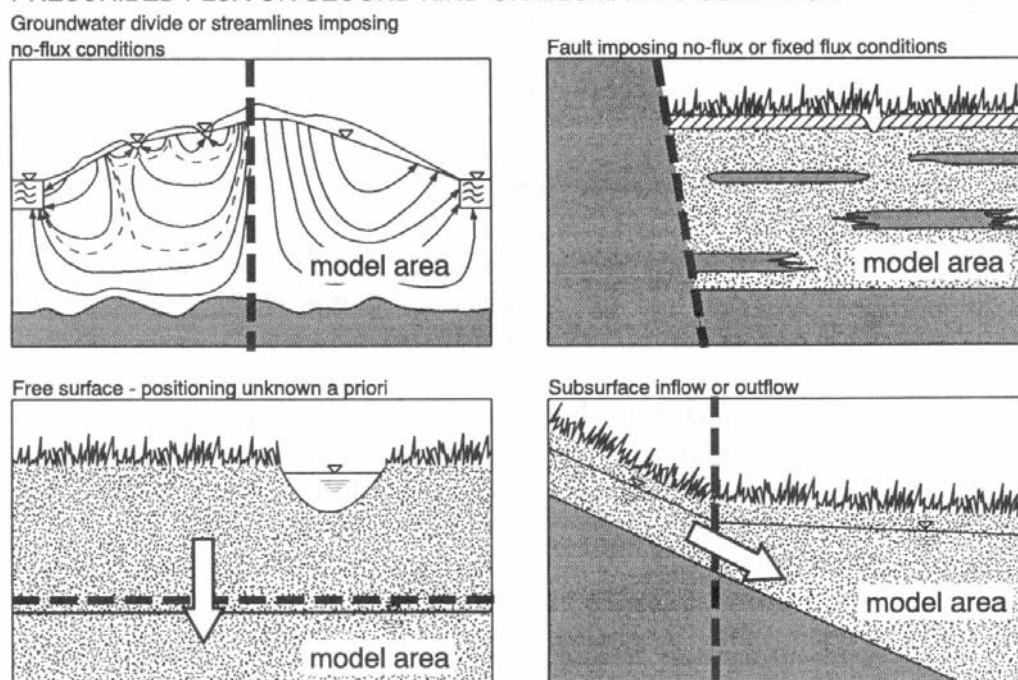
7.1.1 Betydning af valget af randbetingelser

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 5.

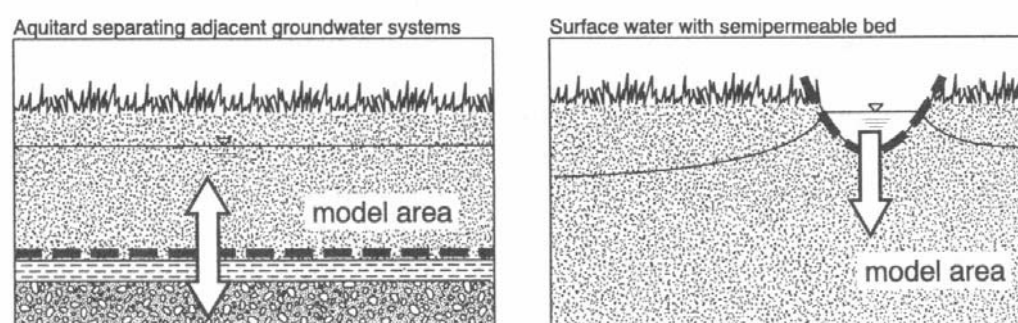
PRESCRIBED HEAD OR FIRST KIND OR DIRICHLET'S CONDITION



PRESCRIBED FLUX OR SECOND KIND OR NEUMANN'S CONDITION



SEMI-PERMEABLE OR THIRD KIND OR CAUCHY'S CONDITION



--- model boundary

Figur 7.1 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 grundvandsopland. 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 specifikationen 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 overstyrende vil modellen helt miste sin interne dynamik og dermed sin berettigelse.

7.1.2 *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 gennemsnitslig tilstand i en periode, hvor forholdene tilnærmelsesvis er uforandrede. Ved en ikke-stationær modellering af et grundvandsopland 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.

7.2 *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 grundvandsopland, 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 opland og grundvandsopland. 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 8.2. 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.

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

7.3.1 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 oplandskala. 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 6.

7.3.2 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.

7.3.3 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.

7.3.4 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 overfladestrømning. 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.

7.3.5 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 tidslig 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 afsenkning. Hvis afsenkningen 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 ud fra 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.

7.4 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 8 DISKRETISERING AF MODELOMRÅDET I TID OG STED

Adam Brun

IHA – Ingeniørhøjskolen i Århus

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, finite differens eller finite 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 ud fra ønsket om en passende beregningsnøjagtighed.

8.1 DISKRETISERINGSTYPER

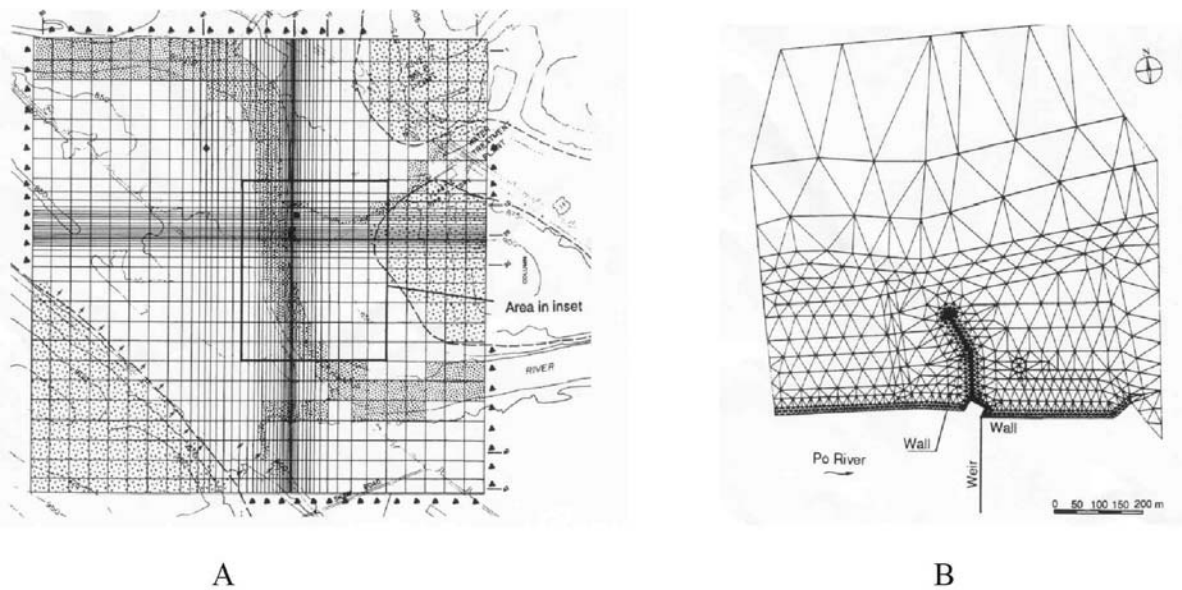
En numerisk løsning af strømning ligningen medfører, at modelområdet må opdeles i beregningsområder, såkaldte beregningsceller. Denne samling af beregningsceller kaldes her det numeriske net. Hver beregningscelle har individuelle parameterværdier. Generelt er der to forskellige metoder til at opdele den fysiske model i beregningsceller, finite differens (FD) og finite 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 med større nøjagtighed beskrive rundinger på randene. En tilsvarende præcision med FD vil kræve en finere diskretisering.

8.1.1 FD og FE

Finite differens er baseret 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 8.1.

Finite 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 idet 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 ud fra afstanden. Vægtningfunktionen vil typisk være lineær men også andre former for vægtningfunktioner kan anvendes. I det tilfælde at man anvender samme 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

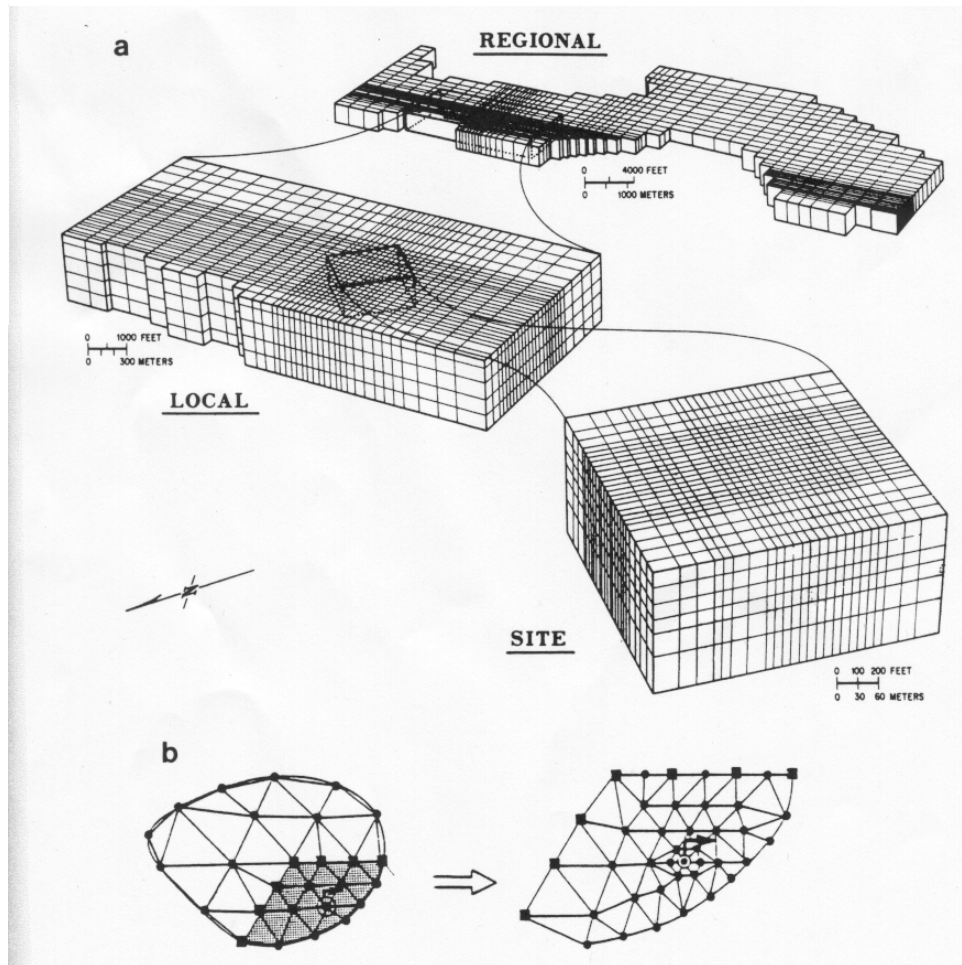
8.1, hvor der er anvendt triangulære elementer. Typisk, men ikke nødvendigvis, vil man lade top og bund have sammen størrelse og overlejlre hinanden, hvilket giver beregningstekniske fordele. Ved meget komplekse geometriske former vil vægtningsfunktionerne være meget komplekse. Dette vil igen resultere 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 genererer en hurtigere løsning. Ved denne simplifikation 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.



Figur 8.1 A: Eksempel på finit differens beregningsnet B: Eksempel på finit element beregningsnet.

8.1.2 Ækvidistante eller varierende grid

Det er muligt for både FD og FE at forfine beregningsnettet i delområder. Dette er vist i figur 8.2. Den 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 7. 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 8.2 Eksempel på anvendelse af delmodeller i finit differens (a) og finit element (b) beregningsnet.

8.2 TIDSSKRIDT

En numerisk model er inden start fodret med startbetingelser, også kaldet initialbetingelser, se kapitel 10. Disse startbetingelser beskriver, hvordan trykniveauet er i hver enkelt beregningscelle. 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 (tidskridt) 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 tidskridt svarende til brugerens ønsker. Dog kan det være nødvendigt at lave tidskridtet kortere i perioder for at sikre nøjagtigheden, se afsnit 8.2.3.

8.2.1 Valg af diskretisering

To modstridende faktorer bestemmer valget af diskretiseringen. Ønsket om præcision medfører et behov for mange beregningsceller og små tidskridt, 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 $\frac{1}{2}$ -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.

8.2.2 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 parameterværdier 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 postprocessering 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 ikke tilsvarende belyst i litteraturen. Generelt vil man forsøge at holde antallet nede, idet 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 måde vil stoffet, måske noget misvisende, blive transporteret vertikalt meget hurtigt.

8.2.3 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 specifi-

kation 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.

8.3 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.

8.3.1 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 konvergenzkriterium. Konvergenzkriteriet udtrykker altså den "fejl", der maksimalt må være ved løsningen af matricesystemet for ét tidsskridt. Konvergenzkriteriet udtrykkes typisk ved, at der ikke i nogen beregningscelle må overskrides en maksimal variation i trykniveauet mellem iterationer. Konvergenzkriteriet angives typisk af brugeren. Hvor stor indflydelse det har på beregningerne, er meget afhængigt af den specifikke modelopsætning. Hvis konvergenzkriteriet 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 konvergenzkriterium vil således ikke kunne observeres tydeligt i trykniveau-beregningen. 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, hvorved modellen genererer eller fjerner vand. En sådan vandbalancefejl vil blive rapporteret af de fleste koder, enkelte kan indbygge det som et ekstra konvergenzkriterium, og man vil 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 konvergenzkriteriet så lavt, at det både tilgodeser vertikale og horisontale gradienter, i mange tilfælde ned til 1 mm eller under. Typisk vil man sætte konvergenzkriteriet lidt højere i de indledende simuleringer for at få beregningerne til at køre hurtigere. Ved de endelige produktionskørsler vil man så reducere konvergenzkriteriet til, hvad der af beregningstidsmæssige årsager er muligt. Et for lavt konvergenzkriterium kan medføre, at løsningsalgoritmen aldrig vil opnå det ønskede konvergenzkriterium. 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.

8.2.4 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. Et 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 finite 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 tidshorizont på typisk dage.

8.4 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.

8.5 REFERENCER

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

Kapitel 9 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 væsentligt 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.

9.1 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> 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 korrektionsfaktorer 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 9.1 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 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 er 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.

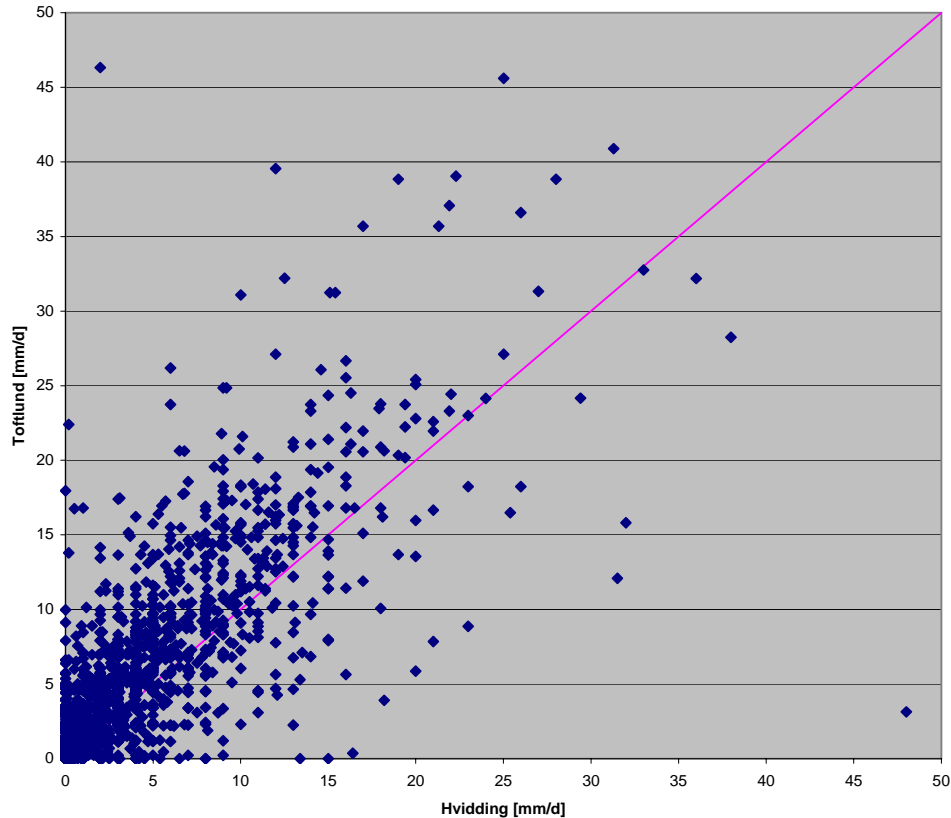
I et dobbeltmasseplot, hvor nedbøren fra de to stationer plottes mod hinanden, figur 9.1, er det tydeligt, at der er relativ god korrelation mellem de to stationer, men forholdet mellem dem er forskellig fra 1. Nedbøren over modelområdet er fordelt efter en topografisk nøgle, hvor data for Toftlund repræsenterer 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).

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 fordampes 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 potenti-

elle 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 der dog ofte ses bort fra.



Figur 9.1 Dobbeltmasseplot af nedbøren fra station Hviding og Toftlund

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 månedsaafhængige 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 fordampningsformel, 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 fordampning i det såkaldte klimagrid i opløsningerne 20x20 km² og 40x40 km², Scharling (1999b). Dansk Jordbrugsforskning (DJF) er den normale leverandør af data vedrørende potentiel fordampning. Herfra 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 fordampning og temperatur, som også indgår i modelberegningerne 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.

9.2 AREALANVENDELSE, JORDTYPER, JORDFUGTIGHED OG AKTUEL FORDAMPNING

Den aktuelle fordampning er om muligt endnu sværere at måle end den potentielle, da den afhænger af den potentielle fordampning, arealanvendelse samt jordfugtigheden og den såkaldte rodzonekapacitet i de pågældende jordtyper i det konkrete område. Hvis man vil beregne den aktuelle fordampning, 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 fordampning. 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 roddebyde for planterne. Andre begreber, som kan indgå i beregningen, er bladdækket eller bladarealindeks og rodfordeling over dybden.

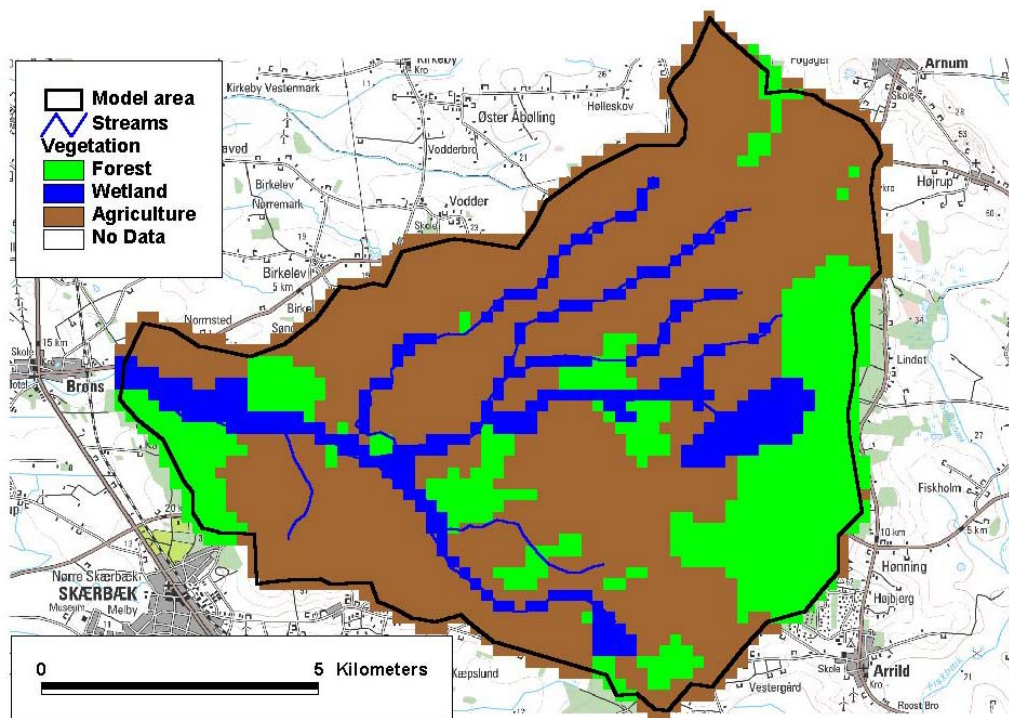
Beregningen af den aktuelle fordampning er ofte baseret på at bestemme reduktionen af den potentielle fordampning. I Suså-modellen, Refsgaard (1981), er der beskrevet en metode, hvor reduktionsfaktoren beregnes som produktet af reduktion grundet ikke-optimal bladdække og reduktioner grundet jordfugtighedsbegrænsninger 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 fordampning, 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 fordampning 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.

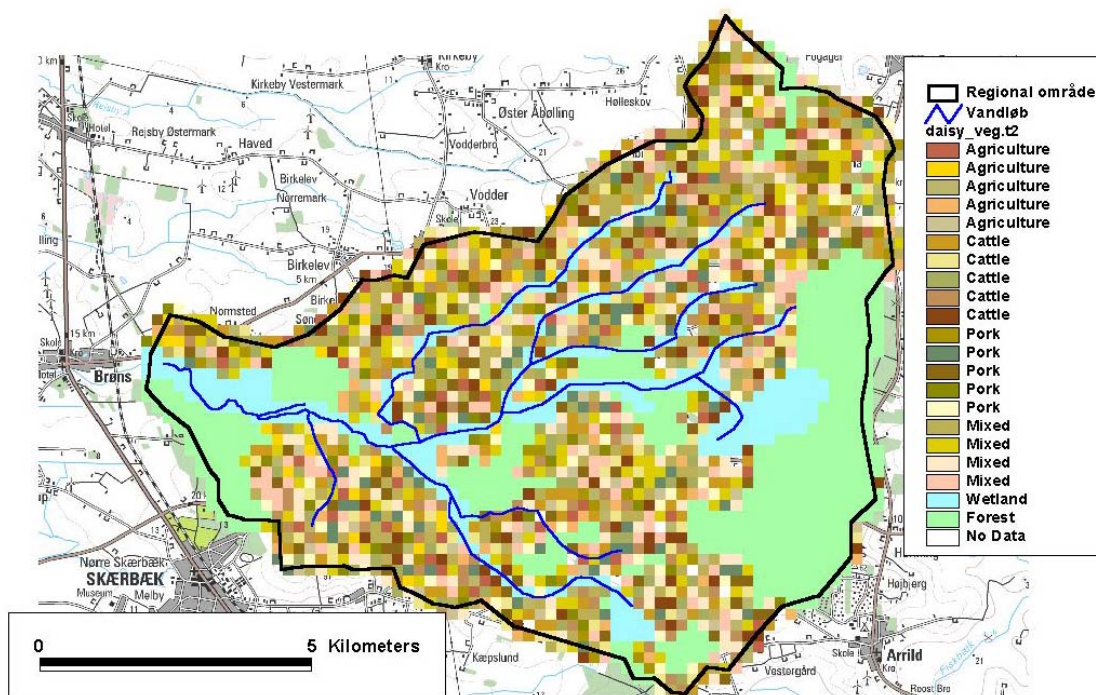
MIKE SHE modellen anvender en lidt mere kompliceret metode, idet vandindholdet i jorden beregnes ved løsning af de fulde ligninger for strømning under umættede forhold, og anvender det beregnede vandindhold direkte i beregningen af den aktuelle fordampning. Ellers ligner MIKE SHE modellens metode andre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

I alle metoder er der en arealmæssig 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 beregnings-elementer, 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 – roddebyde, 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.



Figur 9.2 Opdeling af modelområdet Brønns Å i hovedgrupper for arealanvendelse



Figur 9.3 Fordeling af sædskifter i det regionale modelområde, Brønns Å

I eksemplet Brønns 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 9.2. 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 9.3 viser, hvorledes landbrugsområdet ved en tilfældighedsfordeling er delt op i de enkelte afgrødetyper.

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 http://www.dmu.dk/udgivelser/kort_og_geodata/ais 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.

9.3 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 tidlig 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 pumpekarakteristik. På denne måde kan den tidslige 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.

9.4 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 borer 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 fejlkilder. 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 for eksempel 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 nærliggende områder, og interaktion 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 gange 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 pejledata ligger primært i at pejlningen kan være foretaget for tæt på kildepladser med skiftende oppumpning fra borerne. Dette kan influere direkte på pejlningen og kan give anledning til misfortolkning af variationer i potentialet.

9.5 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 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 synkronmålekampanjer, 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 af grundvandstilstrømningen og dens variation i oplandet.

9.6 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 Planteavlfsforsøgs 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 udarbejde af DHI – institut for vand & miljø, maj 2000.

Kapitel 10 DYNAMISK MODEL

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Rodzonemodul, umættet zone, overfladisk afstrømning, vandløbsafstrømning, kobling, integreret modellering, transient grundvandsmodel, nettonedbør og overflade modelstruktur, Daisy GIS, MIKE SHE, MODHMS

ABSTRACT: Dynamiske 3D grundvandsmodeller kræver i forhold til stationære modeller indbygning af overflademoduler og der findes forskellige eksempler og ambitionsniveauer for transiente grundvands-overflademodeller, med forskellige valg af overflade modelstruktur og kobling mellem grundvand og overfladevand. I kapitlet præsenteres en oversigt over fire hovedtyper (type 1-4). To af disse typer (type 1: transient grundvandsmodel og type 3: distribueret grundvands-overfladevandsmodel) beskrives nærmere med henblik på modellering af input til grundvandsmodellen. Den største fordel ved den dynamiske model er muligheden for en bedre kalibrering og validering af modellen med udnyttelsen af vandbalancedata (pejletidsserier og afstrømningsdata). Kapitlet afsluttes med forslag til hvornår der kan anvendes stationær model og dynamisk model i forbindelse med forskellige modelsimuleringer.

10.1 INDLEDNING

Opdraget til nærværende kapitel kan kort beskrives som følger: ”*Foruden guidelines i hvorledes dynamisk simulering skal foretages, skal kapitlet beskrive værdien af dynamisk simulering i forhold til stationær simulering, og give anbefalinger for hvornår der bør anvendes dynamisk frem for stationær model. Ligeledes skal der fokuseres på anbefalinger for den tidslige diskretisering for forskellige modelopgaver*” (referat fra møde i følgegruppen for videregående grundvandsmodelkursus).

Vi har mulighed for at fodre den dynamiske model med daglig nedbør, temperatur og potentiel fordampning og tilmed undersøge hvor godt modellen beskriver f.eks. kontinuerlige eller månedlige pejlinger og f.eks. daglige vandføringer. Noget sådant kan vi ikke gøre med en stationær model. Det betyder at værdien af den dynamiske model primært er knyttet til den bedre mulighed for udnyttelse af alle de data der foreligger for systemet uden processering af f.eks. midlede værdier.

Centralt i den forbindelse er muligheden for at validere modellen f.eks. ved split-sample test, hvor perioden opdeles i en kalibrerings- og en valideringsperiode, og det således kan dokumenteres hvilken troværdighed den kalibrerede model har. Det er ikke i tilnærmelsesvis samme grad muligt at validere en stationær model, ja mange forskere og praktikere vil nok mene, at det kan være ret tvivlsomt om en stationær model overhovedet vil kunne valideres. Så værdien af en dynamisk model er for det første en mulighed for validering. At vi så tit vælger at lave nogle stationære simuleringer (fordi det er en tilstrækkelig god tilnærmelse) af f.eks. grundvandsdannelse eller indvindingsoplande (partikelbaner) baseret på en stationær version (af den kvalitetssikrede og validerede dynamiske model) er en anden sag.

10.2 KATEGORISERING AF MODELTYPER

Guidelines i dynamisk simulering omhandler her grundvands-overfladevandsmodellering. Udgangspunktet kan være alt lige fra: (0) en stationær grundvandsmodel, (1) en transient grundvandsmodel med simple randbetingelser på overfladen (fx månedlig input af grundvandsdannelse,

dræn / river randbetingelser), (2) en dynamisk, distribueret model for overfladevandssystemet med en forenklet beskrivelse af grundvandssystemet (lineært reservoir), (3) en dynamisk 3D model af grundvandssystemet, med en forenklet beskrivelse af overfladevandssystemet (forsimpleret modelstruktur f.eks. rodzonemodul, og jf. MODFLOW stream randbetingelse eller løs kobling af Daisy/MIKE SHE) samt endelig (4) en fuldt koblet og fysisk baseret rumligt distribueret overfladevands-grundvandsmodel, se tabel 10.1.

Tabel 10.1 Hovedtyper på grundvands-overfladevandsmodeller

Hovedtype	Overflade	Grundvand	Kobling
Type 0 Stationær grundvandsmodel	grundvandsdannelse + drain/river/lake	MODFLOW eller MIKE SHE (3D)	Akvifer-river exchange
Type 1 Transient grundvandsmodel, uden overfladekomponent	Grundvandsdannelse + drain/river/lake	MODFLOW eller MIKE SHE (3D)	Akvifer-river exchange
Type 2 Distribueret overfladevandsmodel uden 3D grundvand	NAM/MIKE 11, MIKE SHE	Simpelt lineært magasin	'Lumped' kobling af overflade-grundvand
Type 3 Distribueret overfladevandsmodul incl. 3D grundvand	Daisy, DK rodzone, MIKE SHE/MIKE 11	MIKE SHE eller MODFLOW (3D)	Forskellige grader af koblinger UZ,OC,SZ
Type 4 Overflade-grundvand incl. fuld koblet 3D umættet-mættet	MODHMS og med 2D overland flow	MODFLOW framework	Ligningssystem for UZ-SZ løses samlet

En transient version af den rene grundvandsmodel (type 1) vil primært være relevant i situationer hvor der i forvejen er opstillet en stationær model, og hvor en nærmere validering af denne model er ønskelig. Et væsentligt argument for den dynamiske model er nemlig at man herved får meget bedre mulighed for at vurdere modellens gyldighedsområde, idet det bliver muligt at inddrage årstidsvariationer i input og output i vandbalancen til valideringstests. Der er begrænsede muligheder for at validere en ren stationær model. Herudover er der med en transient grundvandsmodel mulighed for at vurdere tidlige variationer i f.eks. baseflow til vandløb og søer og tidlig udvikling i trykniveau efter ændringer i f.eks. oppumpning. Det kan i visse situationer være relevant for vurdering af klimatiske ændringer eller betydning af årstidsvarierende oppumpninger (f.eks. vanding) på grundvandsdannende oplande og indvindingsoplande. Vi kommer ind på denne forenkledede modeltype sidst i kapitlet.

Fokus for Håndbog i grundvandsmodellering er ikke forenklinger af grundvandssystemet. Derfor vil type 2 ikke blive beskrevet i nærværende kapitel. Betydning af forskellige modelstrukturvalg for model type 2 kan findes i f.eks. Butts et al. (2004) og Ajami et al. (2004).

Type 3 modellen som består af en flerlagsmodel for grundvandssystemet og en forenklet beskrivelse af overfladevandskomponenterne (f.eks. overfladisk afstrømning, dræn, vandløbsafstrømning, fordampning og nedsvivning fra rodzonen), og ikke fuldt koblede processer er ret udbredt i Danmark. Jeg regner alt lige fra DK-modellen til modeller baseret på Daisy, MIKE SHE og MIKE 11 eller specielle versioner af MODFLOW med tilhørende overfladekomponenter som hørende til denne kategori. Ofte er umættet zone ikke medtaget eller blot medtaget meget forenklet. Denne modeltype består typisk af forskellige 'moduler', som er stykket sammen til et integreret modelsystem, og koblingen (eller manglen på sammen) udgør ofte et centralt problem.

Type 4 modellen, som består af en fysisk baseret, rumligt distribueret model med en 3D beskrivelse af såvel umættet zone og mættet zone, koblet med overfladisk strømning (inkl. vandløb), er fortsat under udvikling og afprøvning (Panday and Huyakorn, 2004). Styrken ved dette koncept frem for f.eks. MIKE SHE er primært på det numeriske felt idet ligningerne for umættet zone-mættet zone løses samlet, det vil sige at koblingen mellem UZ og SZ er løst relativt raffineret. Svagheden er, at systemet indtil videre er under udvikling og afprøvning og at der fortsat er begrænsede interface muligheder. En anden svaghed er store CPU tider og fin diskretisering (i x, y, z og tid), hvilket gør metoden mest egnet til lokale problemer. Type 4 vil ikke blive nærmere beskrevet her.

Opstilling af en dynamisk model (type 1 eller 3) åbner på den ene side for nogen processer og parametre, der skal indbygges i modellen, f.eks. drænkonstant, magasinental osv. Dernæst vil den

numeriske løsninger kræve nogle overvejelser vedr. den tidlige diskretisering og initialbetingelser. Der vil også være nogle nye problemstillinger omkring kalibrering og validering. Og endelig er der grund til at overveje, hvordan modellen skal afgrænses i forhold til ferskvandskredsløbet (valg af type 1 eller 3).

Spørgsmålet om input til modellen er her ret afgørende. Skal modellen arbejde ud fra input bestående af nedbør, temperatur og potentiel fordampning? Eller skal der blot benyttes input i form af nettonedbør f.eks. på ugebasis? Skal modellen simulere vandføring og evt. vandstand i overfladevandssystemer, inkl. overfladisk afstrømning, drænastrømning og vandløbsafstrømning, ja så skal vi som minimum have fat i type 3 eller 4. Hvordan disse ting afgrænses og hvilke valg der træffes i praksis hænger primært sammen med formålet med opgaven, det valgte kompleksitetsniveau (basic, intermediær eller comprehensive), kvaliteten af datagrundlaget osv. Her kan type 1 være en attraktiv løsning på et lidt lavere ambitionsniveau f.eks. intermediær model, hvorimod type 3 er nødvendig på det høje ambitionsniveau.

Til bestemmelse af nettonedbøren kan anvendes forskellige metoder f.eks. følgende hovedtyper på overfladekomponent konfigurationer:

- A - MIKE SHE UZ og fordampning (integreret løsning inkl. UZ)
- B - Simple boksmode for rodzonen (f.eks. DK rodzonen modul, output fra rodzonen routes til SZ eller overlandflow i MIKE SHE)
- C - Daisy GIS (dekoblet løsning men inkl. UZ og dræn)

Type A modellen med fuld integrering af rodzonen, umættet zone, og hvor grundvandsdannelsen beregnes samtidig med, og under indflydelse af grundvandsspejlets beliggenhed, er uden diskussion den mest sofistikerede og mest korrekte løsning på grund af den fulde kobling. MIKE SHE modellen består af en række moduler, der hver især udgør en hydrologisk proces, som alle er koblede, f.eks. ET modulet som beregner fordampningen ud fra oplysninger om potentiel fordampning, vegetation og vandindhold i umættet zone; OC-modulet, som beregner den overfladiske afstrømning; MIKE 11 modulet, som indeholder en vandløbsbeskrivelse; UZ modulet, som beregner forholdene i den umættede grundvandszone; og selve SZ modulet, som beregner strømmingen i mættet zone (i 3D). MIKE SHE har to alternative beregningsmoduler for umættede zone. En "simple" og "Richards ligning". Richards ligning tager hensyn til kapillære kræfter, hvilket betyder, at vand kan stige op og fordampe under tørre perioder. Den "simple" løsning benytter ren gravitationsstrømning. Modellen er ikke udviklet så den kan håndtere f.eks. udvaskning af kvælstof.

Type B modellen er den som anvendes i DK-modellen. Ved hjælp af et relativt simpelt rodzonen modul foretages på daglig basis en beregning af vandindhold i rodzone, fordampning og nedsivning fra rodzonen (inkl. snesmeltning). Outputtet fordeles på baggrund af GIS temaer for befæstede arealer, terrænhældning og lerindhold mellem vand, der ledes til overfladen (overland flow OC) og vand der ledes til grundvandet (SZ) ved hjælp af en såkaldt partitioneringskoefficient på grid-basis (dummy-koefficient), se Henriksen og Sonnenborg (2003) og Plauborg et al. (2002). Modellen opererer med en opdeling i 6 typer: skov, vådområde, landbrug på sand over og under 50 meter, landbrug på ler over og under 50 meter, samt for Jylland desuden 4 typer der beskriver kunstvandede landbrugsafgrøder. Modellen kan ikke håndtere udvaskning af kvælstof. Modellen ser bort fra forsinkelse i umættet zone, men partitioneringen mellem SZ og OC udgør en praktisk effektiv løsning på stor skala.

Type C modellen Daisy er en jord-vegetations-atmosfære-model udviklet til at simulere vandbalance, varmebalance, stofbalance og afgrødeproduktion i jordbrug styret med forskellige managementstrategier. Daisy er en 1D model udviklet og valideret på punkt- og markskala på den Kgl. Veterinær og Landbohøjskole (KVL). DHI har udviklet Daisy GIS, der kombinerer en række zonerede kort, der findes i et givent område. Ved at tilknytte parametre til de zonerede områder, kan der foretages Daisy-beregninger. Modellen kan eksempelvis anvendes til simulering af perkolation til grundvandet. Mængden af nedsivende vand lige over grundvandsspejl eller lige over et eventuelt drænniveau betegnes nettonedbør. Kortgrundlaget og dermed de data der inddrages i Daisy-beregningerne, dækker over jordtyper, arealanvendelse, klima og dræn/grundvandsforhold (Storstrøms amt, 2003). Daisy er ikke koblet til grundvandsmodellen og nedre randbetingelser

fastlægges typisk i kategorier efter middel eller stationære trykniveauer fra tidligere (iterationer) / afviklinger af grundvandsmodelkørsler. Det vil sige at modellens resultater dermed vil afhænge meget af hvordan randbetingelsen (dybden til grundvandsspejlet) specificeres. Der er fortsat en række uløste problemer vedr. den manglende kobling af MIKE SHE og Daisy, som giver problemer med at simulere dynamikken korrekt (f.eks. efterårsafstrømninger). Konceptet er endnu ikke fuldt ud modnet til rutinemæssig anvendelse ved integreret modellering. Dette har specielt vist sig ved standard parametrisering af Daisy på lerede oplande, hvor der er en på oplandsskala hurtig respons ved kraftige nedbørshændelser, som ikke simuleres (fuldt ud) med Daisy. Der er i øvrigt ikke indbygget egentlig 'bypass' rutine i Daisy, i lighed med de 'lumped' rutiner der findes både i MIKE SHE rodzonemodulet og i DK-modellens rodzonemodul.

I litteraturen findes eksempler på tilsvarende overvejelser omkring nødvendighed af at inkorporere den vigtige partitioneringsproblematik for afstrømningsgenerering og grundvandsdannelse (Liang and Xie, 2003) grundet 'rumlig sub grid heterogenitet' i fordeling af nedbør og jordbundsforhold. Mange af de nuværende integrerede modeller tager ikke direkte hensyn til 'sub grid heterogenitetens betydning' på infiltration og grundvandsdannelse. I den gamle version af MIKE SHE UZ var der en mulighed for en 'lumped løsning' med 'bypass flow'. I Daisy er der ikke i øjeblikket tilsvarende mulighed. Der hersker derfor lidt uklarhed om hvordan dette problem i praksis løses, men det er væsentligt specielt når der modelleres på vandområdedistriktniveau, altså større skala at tage behørigt hensyn til betydningen af sådanne processer indenfor de 'store modelgrids'.

På den anden side udgør muligheden for stofmodellering, f.eks. kvælstofudvaskning, nogle anvendelsesmuligheder som type A og B ikke kan dække. Ved valg af Daisy vil det normalt ikke være muligt at beskrive afstrømningen (R^2 værdier) med samme nøjagtighed som type A og B. Der foreligger standardværdier for opsætningen af Daisy (KVL et al., 2003).

Der er en risiko for at flere koblinger, et stort antal UZ søjler, meget detaljerede beregningslag, detaljerede MIKE 11 opsætninger osv. kan resultere i en type 3 model, der er mindre gennemskuelig og i realiteten må siges at være overparameteriseret. Arbejdet med den konceptuelle model kan i så fald risikere at drukne i detaljerigdom og fragmenterede tekniske problemer. Derfor er der en reel udfordring i, at balancere og foretage en kritisk afvejning af, hvad der er optimalt, og så foretage et modelvalg, der både giver optimale betingelser for kalibrering og validering af modellen, og samtidig indeholder så meget procesviden og detaljerigdom, som muligt. Det vil sige at valg af modelstruktur (processer, strukturering af overflademodellen osv.) er centrale forudsætninger i forbindelse med den konceptuelle model og den efterfølgende opsætning og kalibrering/validering.

10.3 INPUTDATA TIL BEREGNING AF GRUNDVANDSDANNELSE

Klimadata

Opgaven er her at vælge enten at basere beregningerne på stationer og f.eks. arealdistribuering jf. Thiesen polygoner eller basere beregningerne på griddata (nedbør f.eks. 10 km, fordampning og temperatur f.eks. 20 km eller nedbør og fordampning f.eks. 40 km jf. DK-model). Dette valg afhænger primært af modelskala og anvendelse af modellen. Det er dog vigtigt at følgende anbefalinger bliver fulgt:

- Inddeling i klimazoner kan baseres på Thiesen polygoner (ud fra faktiske nedbørs- og klimamålestationer) eller på griddata (10 x 10, 20 x 20 og 40 x 40 km) afhængigt af formål for opgaven. Der er fordele og ulemper ved begge dele. Hvis der anvendes input fra 40 x 40 km grid bør man nok, som det er sket med DK-modellen, indbygge en distribuering indenfor det enkelte grid ud fra en højdemodel (hhv. < 50 m og > 50 m i DK model sammenhæng). Grundlag for griddata kan findes på DMI's hjemmeside hvor disse findes rapporteret (www.dmi.dk).
- Anvendelse af retningslinier beskrevet i Plauborg et al. (2002), der beskriver (1) hvordan nedbør bør korrigeres for vind- og befugtelsestab, (2) hvordan potentiel referencefordampning (for kortklippet græs) kan korrigeres til potentiel fordampning for forskellige afgrøder, skov og vådområder og (3) at Makkink fordampning bør anvendes i stedet for modificeret Penman.

- Der pågår fortsat en udvikling af specielt nedbørskorrekationen og spørgsmål vedr. korrektion af fast og flydende nedbør i vinterperioden er endnu ikke dokumenteret fuldt ud. Derfor vil man risikere at overvurdere nedbøren såfremt man benytter standardkorrektionsfaktorer 1961-90 (Allerup et al., 1998), og ikke tager hensyn til temperaturen. Der er i dag ca. 150 klimastationer, og der arbejdes fortsat på en bedre arealdistribuering af et sæt dynamiske nedbørskorrekationer hos DMI. Resultater af dette arbejde bør indarbejdes i modellerne så snart de foreligger.
- DK-modellen vil ofte kunne udgøre en brugbar referenceramme for modeller på mindre skala (Henriksen og Sonnenborg, 2003). Fordelen ved at spejle input til modelopstillinger baseret på type A eller type C i DK-modellens nettonedbør er, at sidstnævnte er 'kalibreret' på baggrund af modelleringen i DK model regi af ferskvandets kredsløb ved sammenholdelse med trykniveau i grundvand og afstrømning til vandløb. Herved er der fastlagt et sæt korrektionsværdier, som nettonedbøren er multipliceret med. Når der foretages modellering for et mindre opland, kan randbetingelser og evt. manglende mulighed for kalibrering og validering af dynamisk model derfor svække vurderingen af nettonedbørsinputtet baseret på Daisy. Selvom den lokale model arbejder med en finere skala, vil det ofte være muligt at sammenholde aggregerede tal med tilsvarende tal fra DK-modellen.

Det anbefales stærkt at foretage en sammenligning af beregnet nettonedbør med en vurdering af forskellige afstrømningskomponenter på deloplandsbasis ved sammenligning af beregnet perkolation med summen af målt afstrømning i vandløb, oppumpning, og grundvandsudstrømning på tværs af topografiske deloplande mm. Såfremt modellen efter endt kalibrering og validering fortsat viser sig at give systematiske misforhold mellem simuleret og målt afstrømning, selv om vandbalancen i øvrigt ser pålidelig ud og de anvendte parameterværdier er indenfor rimeligt realistiske grænser, ja så er den sidste udvej naturligvis at 'justere' inputdata, så modellen producerer et rimeligt vandbalancefit (f.eks. Fbal værdier for vandløbsmålestationer).

På en måde er det befriende og samtidig bekræftende i forhold til brug af modeller, at vandbalancen ikke altid går op, uanset bestræbelserne på at finde passende anbefalinger til nedbørskorrektion eller brug af fordampningsdata (jf. Plauborg et al., 2002). Hvis det derfor, på trods af at anbefalinger har været fulgt til punkt og prikke (brug af håndtal for nedbørskorrektion på landsplan for 1961-90, brug af Makkink fordampning og brug af vegetationsafhængige afgrødekoefficienter for landbrugsafgrøder på ca. 1,1 og værdier for skov og vådområder på ca. 1,2), fortsat viser sig at være en fejl på vandbalancen f.eks. udtrykt ved at modellen simulerer 10 % for meget afstrømning (eller mere), så anbefales det som en sidste udvej at multiplicere nettonedbøren med en korrektionsfaktor (f.eks. 0,9 hvis der simuleres 10 % for meget), men så i øvrigt at rapportere dette misforhold, så problemet kan kommunikeres videre til beslutningstagerne og ansvarlige myndigheder. Der er et helt klart behov for videnopbygning, forskning og overvågning af vandbalancen, og der er et fortsat behov for fokus på konsistens af de forskellige inddata, der indgår i vandbalancen. Derfor må vi fortsat leve med alvorlige fejl i vandbalancen, men det er således legitimt at justere inputtet blot der foreligger en rimelig troværdig hydrologisk model, der kan bidrage til at understøtte brugen af denne nødløsning. Historiske variationer i nedbør og fordampning og resultater fra DK-model kan findes i Ferskvandets Kredsløb (www.vandmodel.dk), se Henriksen og Sonnenborg (2003).

I den nyere litteratur findes der eksempler på test af, hvordan nedbørsdata baseret på 'next generation radar network' (NEXRAD, 4x4 km) har betydning for kalibrering og validering af den hydrologiske model (Butts et al., 2004; Ajami et al., 2004; Guo et al., 2004). Resultaterne er dog ikke entydige, men tyder foreløbig på at det ikke uden videre giver bedre performance (valideringstests) med mere forfinet modelstruktur, hvorimod kalibreringsresultatet ser ud til at blive forbedret specielt for afstrømningen fra oplandet. Det kunne tyde på det føromtalte problem med overparameterisering, således at flere detaljer i overflade modelstrukturen bør afvejes i forhold til den praktiske mulighed for kalibrering og validering af modellen (det vil sige grundlaget i form af kvalificerede observationsdata).

Ajami et al. (2004) sammenlignede resultater af en 'lumped' model og en 'semi distribueret' overfladevandsmodel (type 2) og fandt at introduktionen af mere overflade modelkompleksitet

(NEXRAD radarnedbør, routningsskema og distribuering) gav større usikkerhed på modellen. Slutbudskabet var følgende: *Use of semi-distributed models is preferred because it can provide information about flow condition at interior points of a basin. However, the resulting improvement in simulation capability at the outlet, compared to the lumped model is not yet significant to justify adoption of semi-distributed model.* Konklusionen er derfor, at der er behov for flere tests af radar-baserede nedbørsdata før sådanne evt. vil kunne forbedre nedbørsinputtet til hydrologiske modeller. I Danmark, hvor der er et stort antal målestationer og griddata fra DMI, kan data herfra anbefales. Ovenstående erfaringer fra type 2 modeller er ikke fuldt ud tilstrækkelige til nogen konklusion, fordi det er velkendt at interaktionen mellem grundvand og overfladevand har stor betydning for generering af afstrømning og dynamik i vandløbsafstrømning.

Jordtyper

Datagrundlaget for jordtyper og fordeling af disse er:

- Teksturdata fra DJF teksturdatabase
- Jordartskort 1:200.000 eller 1:25.000 afhængigt af modelskala
- 'Danske jordbundsprofiler', Sundberg, P.S. (1999)
- Jordbunden i landskabet, Granat (2000)

Der arbejdes normalt med 3 horisonter i hver jordtype: en overjord (A horisont), en underjord (B horisont) og udgangsmaterialet (C horisont). Der skal foretages en gruppering i et antal jordtyper for hver horisont, som samlet giver et begrænset antal søjler.

Arealanvendelse

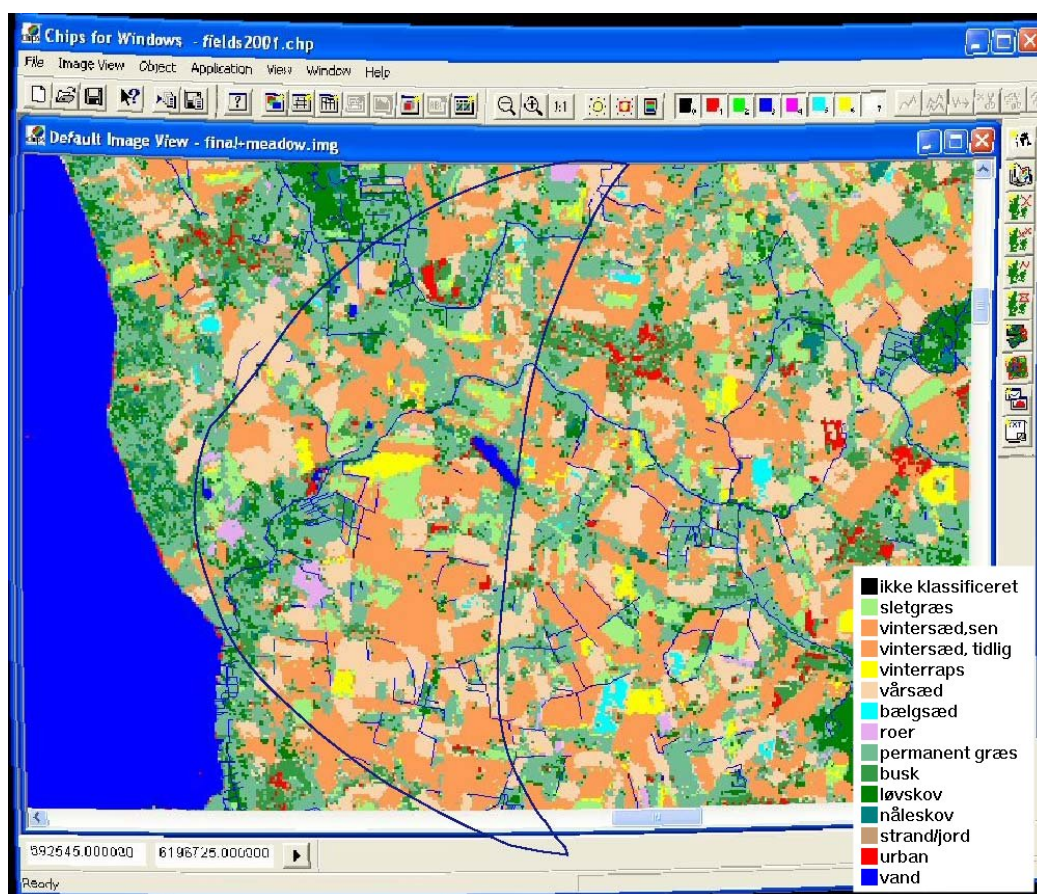
Datagrundlaget for arealanvendelse og fordeling af vegetationer og afgrøder kan f.eks. være:

- Blokkort (med GLR udtræk)
- AIS kort
- Satellitdata (se nedenfor)

Anvendelse af remote sensing data

Satellitbilleder kan indgå til modellering af vandbalancen. Der er en årlig variation i anvendelsen af arealer, som kan kortlægges ved hjælp af satellitdata, og indgå i opsætning af en vandbalancemodel, f.eks. til en løbende justering af input til modelberegninger (Bøgh et al., 2003). Når solens stråler rammer jordoverfladen vil en del af strålingen reflekteres. Denne del registreres af satellitbaserede sensorer der måler mængden af reflekteret stråling i separate spektrale intervaller, f.eks. måles ofte i blå, grønne, røde og nær-infrarøde spektrale kanaler. Da den spektrale refleksion er forskellig for forskellige overfladetyper, kan disse data bruges til kortlægning af arealanvendelsen på jordoverfladen. En god klassificering kræver 3-4 skyfrie observationer gennem vækstsæsonen. En sidegevinst ved at anvende jordobservationer til arealanvendelseskortlægning (se figur 10.1) er, at man kan bruge de samme observationer til at bestemme vigtige agro-hydrologiske parametre, som f.eks. bladarealindeks (LAI). Planterne har en karakteristisk stor refleksion af nær-infrarød stråling og en lille refleksion af rødt lys, der er fotosyntetisk aktiv stråling. Disse egenskaber udnyttes til beregning af en såkaldt vegetationsindeks, som er eksponentielt relateret til bladarealindekset (Bøgh et al., 2003).

Remote sensing billeder af vegetationsindex /LAI muliggør ved en kombination med modellen et yderligere (uafhængigt) input, som kan indgå til identifikation af usikkerheder på modellen og simuleringer af vandløbspåvirkninger / samspil med ånære områder som følge af vandindvinding.



Figur 10.1 Eksempler på anvendelse af remote sensing data. Tolkning af arealanvendelse for 2001 udfra Landsat TM 30m. Kilde: Eva Bøgh, RUC. Havelse kildeplads's opland er vist samt et vandløbstema fra AIS.

Til bestemmelse af f.eks. oversvømmede områder, fordamning, vegetationsdække og arealanvendelse er data fra satellitterne ASTER (15 m grid), Landsat TM og Landsat 7 (30 m grid) samt fra EOS/MODIS (250, 500 og 1000 m grid) mest interessante. Landsat satellitterne passerer DK hver uge, mens EOS/MODIS har daglige passager. Vi kan forvente at få ca. 3 – 5 skyfri Landsat scener om året (prisen er ca. 5-7000 kr.) og 1-3 ASTER scener (pris ca. 500 kr.). Skyfri MODIS data kan leveres hver 14. dag (gratis). Landsat data fås 20-30 år tilbage i tiden (til reduceret pris) mens ASTER og MODIS data er tilgængelige for de sidste 4-5 år.

I forbindelse med et jordobservationsprojekt (Dansk forskningsprojekt) har Daisy GIS modellen været anvendt til en detaljeret beregning af den aktuelle fordamning fra jord og planter på time basis (van der Keur et al., 2001). Transpirationen beregnes ved Penman-Montieth metoden, hvorimod jordfordampningen beregnes som en funktion af potentiel jordfordampning og jordhydrauliske parametre på basis af Richards ligning. Bladarealindekset er en vigtig faktor for beregning af fordamningen, fordi det udtrykker det overfladeareal, hvor igennem transpirationen foregår. Kendskabet hertil er specielt vigtigt, når vegetationen ikke dækker jorden fuldstændigt, da fordamningen fra jord og planter kan være meget forskellig (Bøgh et al., 2003).

Information om landbrugsarealanvendelsen muliggør således simulering af en række temaer, som er værdifulde for en bedre dokumenteret hydrologisk overflademodel f.eks. vegetationsudvikling (LAI), afgrødeproduktion (høstudbytte som også kan indgå i validering af Daisy). De foreløbige resultater viser en tendens til at fordampningen stiger, og at model nøjagtigheden forbedres, når satellitdata anvendes til justering af modelberegningerne (i stedet for brug af Daisy GIS standard opsætning), og det kan måske være en medvirkende forklaring til, at der ofte er problemer med 'for meget vand' i de Daisy GIS opsætninger, der har været lavet forskellige steder i landet. En alternativ hypotese til problemet med nedbørskorrektion (specielt fast nedbør i perioder uden frost), kunne derfor være, at fordampningen ikke i tilstrækkeligt omfang beskrives korrekt ved brug af standard parametre til Daisy, eller fordi de områder, hvorfra der reelt foregår potentiel fordampning året rundt, ikke er medtaget i tilstrækkeligt omfang i modelopsætningen.

Randbetingelser til rodzone / umættet zone model

Hvis man anvender MIKE SHE (type 3A eller type 3B) er der en kobling mellem rodzonomodulet og grundvandsmodellen, således at det ikke er nødvendigt at specificere egentlige randbetingelser.

For at bestemme randbetingelser for Daisy søjler (type 3C) kræves imidlertid kendskab til potentiale for det øverste grundvand. Ofte må man basere disse parametre på skøn. Der vil så fremkomme et antal randbetingelsestyper med hhv. fri dræning, dræn, og forskellige dybder til grundvandsspejlet, hvis man kører Daisy GIS.

Data for nettonedbør, jordtype, arealanvendelse og randbetingelser klassificeres og kombineres indbyrdes til at give et antal unikke kombinationer, som der f.eks. foretages Daisy beregninger af (type C). Studier med Daisy GIS har vist, at dybden, hvorfra resultater udtrækkes og overføres til grundvandsmodellen, bør vælges med omhu, se boks 1.

Boks 10.1 Eksempel Lollandsmodel (Storstrøms amt, 2003).

Nettonedbøren, perkolationen til grundvandszonen lige over grundvandsspejl eller dræn niveau, blev beregnet for området Lolland i årene 1980 til 2001. Der blev foretaget beregninger i polygoner specificeret ud fra AIS data, som i landbrugsarealer var blevet opdelt efter blokkort. Informationer om vegetationer per arealanvendelsespolygon var blevet kombinerede med data for klima, jordtyper og drænforhold. Tilsammen blev der fundet 1040 kombinationer, som blev kombineret til yderligere at give resultater for hver af de 23.308 polygoner.

På markerne blev holdt et simpelt sædskifte, med den samme afgrøde år for år. Beregningen af vandstrømningen var mindre følsom overfor afgrøderotationer, blot den rette fordeling af afgrøder for et område var korrekt, hvilket blev opnået ved at anvende GLR (Generelle LandbrugsRegister) data for år 1998. Jordprofiler blev opdelt i fire typer – leret, sandet, marint sand og humus. Datagrundlaget til parameterisering af jordtyperne var GEUSs jordartskort 1:200.000 og DJFs tekstur-data. Ved anvendelse af 3 horisonter var det endvidere ikke muligt at kalibrere parametrene i de enkelte jordsøjler uden jordfugtighedsmålinger, lysimetermålinger eller anden måling af den umættede zone. Til randbetingelser blev anvendt dræn på lerede landbrugsjorde og i øvrigt dybden til grundvandsspejlet. Et etableret potentialekort var noget usikkert, og der var derfor behov for kontrol og justering af dybder, når grundvandsmodellen forelå.

I forbindelse med kalibreringen af grundvandsmodellen og vandbalancen blev der foretaget en genberegning af Daisy nettonedbøren der omfattede følgende tiltag:

- Randbetingelsen for det marine sand i oplandet til Kramnitse pumpestation på Sydlolland blev hævet fra 100 cm til 75 cm dybde, ud fra et argument om at terrænkoten i området stort set er beliggende under havniveau, og at potentialet ligger over terræn i området.
- I de sandjorde, hvor sand var indført på jordartskortets morænelersområder på baggrund af tekstur data i A-horisonten blev randen ændret til 100 cm.
- I søjler med leret jord og fast rand reduceredes den maksimalt tilladelige dybde til randen fra 125 cm til 100 cm.
- I områder hvor potentialekort viste tryk over terræn blev der indført en nedre trykrand.
- Randen til kolonner karakteriseret som "vandhuller" blev justeret til 35 cm.

Ud af de i alt 23.308 polygoner var der herefter kun 581 polygoner, hvor den nedre rand var fastholdt dybere end 175 cm, heraf 90 % på sandede jorde. En følsomhedsanalyse med vinterhvede på sandjord, viste i øvrigt at betydningen af nedre rand dybere end 175 cm var relativt ubetydelig, nemlig 3 mm pr år. For at mindske antallet af Daisy søjler, og dermed beregningstiden, ændredes randen for disse søjler til 175 cm.

Sigtet med fordampningsberegningerne er at få vandbalancen til at stemme, og derfor er det vigtigt, at al fordampningen via rødder foregår over udtræksdybden, hvilket svarer til, at vandet trækkes ud under max. tilladte roddebyde i Daisy (max rooting depth). Omvendt bør man ikke blot vælge at trække resultaterne ud i bunden af de specificerede søjler (typisk 3 meters dybde), hvis randbetingelserne i form af dræn eller fast grundvandsspejl ligger tættere på overfladen. Herved begås en fejl i timingen for overførelse af vand til grundvandsmodellen. Udtræksdybderne bør vælges uafhængig af anvendte randbetingelser.

Konceptet er, at Daisy anvendes til fordampningsberegningerne, og grundvand-vandløbsmodellen beregner alle vandstrømninger, også drænastrømningen. Dræn i Daisy skal således blot opfattes som en af mange typer randbetingelser. Det skal bemærkes, at koblingen mellem Daisy og grundvandszonen er envejs, hvilket betyder, at f.eks. ændringer i grundvandsspejlets beliggenhed ikke umiddelbart påvirker resultaterne fra Daisy (Storstrøms amt, 2003).

Boks 10.2 Eksempel Norddjursland (Århus amt, 2002).

På basis af i alt 2 klimazoner, 4 jordtyper, 6 arealanvendelser + 2 skovtyper i 2 klimazoner og 2 sømråder (i alt 54 kombinationer), blev der foretaget beregninger af nettonedbøren i modelområdet ved Daisy modellen. For hver af de 54 kombinationer (roddebyde, jordtype, klima, nedbør) blev nedsivning, fordampning, vandingsmængde og drænastrømning beregnet. Den arealvægtede infiltration i modelområdet blev beregnet til 287 mm. Især kombinationen af grov- og lerblandet sand med landbrug i klimazone 2 vægtede meget med 20 % arealet. I forhold til tidligere undersøgelser af infiltrationen i området var den nye nedsivningsmængde ca. 10 % lavere end tidligere vurderet.

Boks 10.3 Eksempel Tude å (Vestsjællands amt, 2003).

Nettonedbøren blev bestemt i MIKE SHE af beregningsmodulerne for umættet zone og fordampning. Dette krævede definition af jordbundskarakteristik, drænforhold og arealanvendelse (vegetation) samt input i form af meteorologiske data. De meteorologiske data, der blev anvendt, bestod af daglige værdier for nedbør, temperatur og potentiel fordampning. Værdierne blev angivet som døgnmiddel og blev defineret for perioden 1988-2000. Nedbørsdata blev hentet fra 11 nedbørsstationer, som var jævnt fordelt i modelområdet. I modellen fordeltes nedbøren arealmæssigt ved Thiessen polygoner. Data var korrigerede for vindeffekt og wettingtab med landsdækkende standardværdier. Daglige værdier for temperatur og potentiel fordampning forelå fra 20 km grid og dels fra en klimastation (Flakkebjerg). I modellen blev data fordelt efter 5 klimagrid, som lå inden for området. For årene 1988 og 1989 (hvor klimagrid ikke forelå), anvendtes stationen ved Flakkebjerg. De indhentede data for potentiel fordampning bestemt ved Makkink metoden som en referencefordampning, blev korrigeret afhængigt af arealanvendelsen.

Der blev defineret en overordnet arealanvendelse, som blev opdelt på fire typer: landbrug – overvejende korn, skov, vådområder og byområder. For hver af disse typer blev der defineret en vegetation, som indgik i beregningen af den aktuelle fordampning. Vandtransporten i den umættede zone blev bestemt af de hydrauliske parametre i den øverste del af jordprofilen. Modelområdet var opdelt ved at kombinere jordtype-/bonitetskort, der beskriver de øverste ca. 0,2 m af jordprofilen, med jordartskortene, der beskriver jordlagene fra under muldlaget til 1 m's dybde samt med kort over dybden til den kalkfrie zone.

Ved at kombinere disse kort fremkom en række jordprofiler, som blev tilknyttet hydrauliske parametre i form af retentionskurver og funktioner for den umættede hydrauliske ledningsevne. De hydrauliske parametre blev fastlagt vha. målte værdier for retention og hydraulisk ledningsevne for danske jorde.

Det viste sig i øvrigt at anvendelsen af den simple UZ løsning gav væsentlig forskellig (større) nettonedbør i forhold til den fulde Richards' ligning (forskel ca. 50 mm/år), hvis man blot benyttede samme parameterværdier.

10.4 INTEGRERET MODELLERING

Integreret modellering omfatter flere domæner f.eks. rodzonen/umættet zone, grundvand og overfladevandssystemet, inkl. en rimelig kobling mellem de tre domæner. Der kan være behov for endnu flere domæner koblet på f.eks. økologiske modeller eller socioøkonomiske vurderinger. Kravene til sådanne dynamiske modeller der som minimum giver mulighed for modellering af hele ferskvandskredsløbet er følgende (Middlemis, 2004):

- 3D grundvandsstrømning med eller uden umættet zone, men med en detaljeret beskrivelse af 2-vejs udveksling mellem grundvand og overfladevand, fordampning, drænafstrømning, grundvandsdannelse, indvindinger etc.
- 1D åben kanalstrømning og to-vejs udveksling med grundvand og umættet zone, helst med dynamisk vandstand-areal-volumen-lækage for vandløb, magasiner og vådområder, og specifik repræsentation af vandløb/vådområder geometri, modellering af kontinuerlig nedbør-afstrømnings processer, dynamisk model og hydrauliske strukturer mm.
- detaljeret og præcis vandbalance analyse
- veldokumenteret validering af koden, og rimelig opsætnings- og kørselstider
- grafisk brugerinterface for præ- og postprocessing, helst med et godt GIS interface

Reviews af forskellige modelkoder (CDM, 2001; SFVMD, 2002) har vist at MIKE SHE systemet bedømt ud fra ovenstående kriterier i dag anses for det mest omfattende softwaresystem for fysisk baseret, rumligt distribueret, integreret modellering, med excellence i databehandling og visualisering, og en række praktiske efterprøvninger i forbindelse med integrerede modelstudier. MIKE SHE følges af MODHMS, der er MODFLOW baseret, men med begrænsninger i beskrivelsen af nedbør-afstrømning (f.eks. på daglig basis) og med begrænsninger i beskrivelsen af overfladevandskomponenter på catchmentskala.

Integrerede modeller vil typisk befinde sig indenfor kategorien 'akvifer simulering' (hi fi) eller 'comprehensive modelling' og typisk svare til type 3 modeller jf. introduktionen i dette kapitel.

Første delen af dette afsnit vil derfor kigge lidt nærmere på guidelines i detaljeret og præcis vandbalance analyse som forudsætter tidlig og rumlig distribuering af nettonedbøren. Valget af inputtet til modellen (nettonedbør f.eks. på døgn eller månedsbasis) er formentlig det væsentligste problem der er knyttet til dynamisk modellering.

Der vil blive kigget lidt nærmere på håndtering af overfladeafstrømning, dræn og kanalstrømning ligesom betydning af kobling (eller manglende kobling) vil blive beskrevet. Afslutningsvist ser vi på spørgsmålet om, hvornår det er vigtigt at bruge dynamiske modeller frem for en stationær model.

Opsplitning af nettonedbør mellem grundvand og overfladevand

Modellering af vandkredsløbet på oplandsniveau og generering af overfladeafstrømning forudsætter en rimelig partitionering af nedbøren, det vil sige den del der routes direkte til det øverste grundvand (SZ) og den del der routes til overfladisk afstrømning (OC). Specielt i forbindelse med modeltype 3B og 3C, hvor nettonedbøren beregnes separat, er det nødvendigt at tage nogle forholdsregler i denne sammenhæng. I DK modellen er problemet løst i form af den såkaldte dummy-koefficient, der er baseret på en GIS analyse på 1x1 km gridniveau af:

- Befæstede arealer (-> ca. 1/3 af nettonedbøren routes til OC for befæstede arealer, f.eks. byområder og veje)
- Terrænhældning indenfor griddet (større terrænhældning -> mere vand til OC)
- Områder med lerjord i mere end 70 % af griddet (-> 10 % af nettonedbør routes til OC)

Et af argumenterne for at løse partitioneringsproblemet på denne tilnærmede måde i DK modellen har været at modellen arbejder på stor skala, hvor en række processer på mindre skala således ikke indgår i modellen. Der findes enkelte eksempler på tilsvarende tilpasninger med MIKE SHE modellen og DK-modellens rodzonemodul også på mindre skala, hvor en eller flere af ovenstående tiltag har været taget i brug (typisk som minimum befæstede arealer).

Overland flow

Overfladisk afstrømning er en vigtig komponent i det hydrologiske kredsløb, for styringen af vandstrømningen til og fra overfladen, til vandløb mm. Nærmere beskrivelser af håndteringen af denne 2-D flowkomponent kan findes i MIKE SHE eller i MODHMS manualen. Se hjemmesider fra kodeudviklere: www.dhi.dk og www.modhms.com.

En væsentlig styrke ved MIKE SHE/MIKE 11 konceptet (type 3A-C) i forhold til konfigurationer baseret på Daisy-MODFLOW (type 1) er håndteringen af overfladisk afstrømning. Dynamiske grundvandsmodeller af type 1 vil derfor normalt ikke kunne beskrive afstrømningen lige så godt som type 3A-B modeller, der inkluderer overfladisk afstrømning.

Hvis ikke overfladisk afstrømning håndteres i modellen, bør man reducere nettonedbøren med en tilsvarende del, f.eks. på basis af en nærmere analyse af tidsserier for afstrømningen, hvor den mest overfladenære afstrømning i så fald skal elimineres fra inputtet til grundvandsdannelse.

Samtidig vil det være nødvendigt at benytte enten månedsværdier eller uge værdier for den 'reducerede nettonedbør' i MODFLOW, da det ikke er fordelagtigt at benytte daglige værdier (der benyttes stress perioder).

Dræn og vandløb

Der findes forskellige løsninger på håndtering af vandløb i MIKE SHE (vandløb er beliggende i kanter af grid) og MODFLOW (vandløb håndteres 'blokcentreret'), og valget i opstilling af den dynamiske grundvandsmodel (type 1) består derfor i at vælge, hvordan randbetingelser skal håndteres ved brug af henholdsvis drain eller river (stream package er også en oplagt mulighed, idet denne package holder styr på vandbalancen i vandløb, så der ikke genereres udsivning i tørlagte vandløb). I type 3 konfigurationer baseret på MIKE SHE foregår de fleste valg i MIKE 11 opsætningen, hvor de enkelte delstrækninger kan forsynes med forskellige antagelser vedr. udveksling mellem grundvand og vandløb (direkte kontakt, vertikalt tryktab, eller kombination af vertikalt og horisontalt tryktab).

Dræn kan uden problemer medtages i alle grid i MIKE SHE, hvorimod MODFLOW ikke uden problemer kan forsynes med dræn i alle grid (f.eks. problem ved GMS). Der kan ikke gives nogen endegyldige guidelines for, hvordan man mest fornuftigt sætter dræn op i den hydrologiske model (type 1 eller 3), men man bør som minimum benytte forskellige parameteriseringer for områder uden dræn, med dræn osv. Problemet er dog at finde lettilgængelige og egnede kvalificerede data til en sådan parameterisering. Det kan derfor anbefales at foretage en apriori definition af forskellige typer dræning, så man senere i processen kan forsøge at kalibrere parametre for disse (f.eks. tidskonstant og dybde til dræn i MIKE SHE terminologi).

Det vil også være nødvendigt at tage stilling til om drænafstrømning routes til nærmeste vandløb eller ud af modellen (til randen).

Den nyere litteratur viser, at forøget modelstruktur ikke nødvendigvis giver forbedret performance for f.eks. simuleret vandløbsafstrømning (Butts et al., 2004). Fuld dynamisk routning giver således ikke nødvendigvis bedre performance end forsimplet 'Muskinggum-Cunge routning'.

Se i øvrigt kapitel 7, fastlæggelse af randbetingelser samt anbefalinger for repræsentation af randbetingelser i USGS (2004).

10.5 OVERVEJELSER OM VALG AF STATIONÆR OG/ELLER DYNAMISK MODEL

Indledningsvist skal det slås fast, at det ofte er fordelagtigt at arbejde med både en stationær og en dynamisk model. Herved kan man udnytte, at den stationære model er god til automatisk kalibrering, en teknik som er hensigtsmæssig, fordi modellen så selv justerer de frie parametre, så man får et mere objektive bud på de optimale parametre til grundvandskomponenten (Sonnenborg et al., 2003). Samtidig giver den stationære model relevant feedback på randbetingelser og evt. fejl i opsætningen, idet den regner på en ligevægtssituation og ikke er afhængig af startbetingelser eller effekter af magasinering, der påvirker en dynamisk model (Henriksen og Nyegaard, 2003).

Det er nødvendigt at foretage dynamiske simuleringer for at kunne validere modellen i forhold til afstrømninger og vandbalancer. Derfor er en dynamisk model nødvendig, hvis der skal foretages

en split sample validering, eller hvis tidsserier skal indgå i valideringen. Der er også visse parametre f.eks. tidskonstanter (dræn), magasintal (frit og artesisk), der kun kan kalibreres med den dynamiske model, eller ved skiftende stationære og dynamiske kalibreringskørsler. Med den stationære model kan hydrauliske ledningsevner som regel fastlægges rimeligt sikkert. For en model med f.eks. DK-modellens størrelse med knap 100.000 beregningskasser i grundvandsdelen i hver delmodel, og med beregninger for både grundvand og overfladevand tager det typisk 6-10 timer for 20 års simulering med en dynamisk model. Stationære kørsler tager til sammenligning kun 15-30 min., og da man ikke styrer de parameterværdier, modellen regner sig frem til, så giver automatisk kalibrering her vigtige informationer om, hvorvidt de estimerede parametre er realistiske og beliggende indenfor et forud fastlagt niveau. Endnu et argument for at have noget stationært 'kørende'.

Vurderingen af konceptuel model, randbetingelser og vandbalance forudsætter som illustreret ovenfor en nærmere analyse af grundvands-overfladevands interaktionen. Denne interaktion udgør ofte en ret kritisk komponent i vandbalancen, og udgør formentlig den største kilde til usikkerhed på en ren grundvandsmodel, uanset om denne så i øvrigt er stationær eller dynamisk.

Normalt antages det, at simulering af umættet zone systemet ikke er kritisk. Nedsivning eller lækage fra overfladevand til grundvand antages som en tilnærmelse at ske øjeblikkeligt uden forsinkelse (storage i umættet zone). Rodzonen skal dog helst beskrives ret udførligt, fordi denne zone er styrende for såvel overfladenær afstrømning, som fordampning og nedsivning til grundvandet, og dermed styrende for den samlede vandbalance.

Når man anvender rene grundvandsmodeller (type 1) er man nødt til at foretage forenklinger af beskrivelsen af udveksling mellem grundvand og overfladevand og til det formål antager man enten fastholdt tryk, flux eller trykniveauafhængig flow randbetingelse, så strømmingen ved skillefladen mellem grundvand og overfladevand simpelt kan beregnes som en funktion af de relative trykniveaugradienter for et givent tidspunkt, og en konduktans gennem skillefladen, som i såfald bliver en kalibreringsparameter.

I tabel 10.2 er foretaget en sammenstillet anbefaling til valg af stationær model (type 0), transient grundvandsmodel f.eks. Daisy/MODFLOW (type 1) eller integreret model MIKE SHE/MIKE 11 (type 3A), rodzone boksmodel fx DK model rodzone /MIKE SHE/MIKE 11 (type 3B) eller DAISY/MIKE SHE/MIKE 11 (type 3C).

Følgende kræver dynamisk model:

- Ikke stationære problemstillinger (f.eks. effekt af vandindvinding)
- Sæsonmæssige variationer
- Ekstreme hændelser (oversvømmelse og minimumsafstrømning)
- Grundvand-overfladevands interaktion

Tabel 10.2 Valg af stationær contra dynamisk model, modificeret ud fra USGS (2004), idet brug af 'superposition' indikerer at modellen kun beskriver ændringer som følge af påvirkninger, 'valideret og usikkerhedsvurderet model' angiver at grundvandsmodellen er godt kalibreret og altså beskriver de absolutte størrelser (flow, vandstand osv.) med en kendt nøjagtighed (eller unøjagtighed). Ved basal forståelse af grundvandssystemet anbefales 'basic model' ellers 'comprehensive'

Problemtype	Begrundelse for Modelstudie	Model approach	Valg af modeltype: - Stationær (type 0) - Transient grundvand (type 1) - Integreret model (type 3A, 3B eller 3C)
Basal forståelse af grundvandssystemet	Undersøgelse af hydrologiske processer	- basic model - superposition - partikelbane simulering	type 0 og/eller type 1
	Bestemmelse af monitoringsbehov	- basic model - valideret og usikkerhedsvurderet model - superposition - partikelbane simulering	type 0 og type 1
	Foreløbig model til vurdering af nuværende forståelse (vurdering af konceptuel hydrogeologisk model)	- basic model - valideret og usikkerhedsvurderet model - superposition - partikelbane simulering	type 0 og type 1
Estimering af grundvandsmagasin forhold	Analyse af pumpeforsøg og andre akvifer-tests	- valideret og usikkerhedsvurderet model - superposition	type 1 eller type 3A/3B afhængig af om vandløbspåvirkning indgår
	Bestemmelse af parameterværdier	- valideret og usikkerhedsvurderet model	type 0 og type 1 eller type 3A/3B/3C
Forståelse af historikken (the past)	Forståelse af historiske udnyttelse af grundvandet	- valideret og usikkerhedsvurderet model	type 0 og type 1 eller type 3A/3B (sidstnævnte anbefales!)
	Fastlæggelse af 'upåvirkede forhold'	- valideret og usikkerhedsvurderet model	vand: type 3A/3B nitrat: type 3C
Forståelse af det nuværende system	Bestemmelse af effekten af vandindvinding på overfladevandssystemer	- valideret og usikkerhedsvurderet model - superposition - partikelbane simulering	type 3A eller 3B
	Bestemmelse af indvindingsoplande og grundvandsdannende oplande (sårbarhedsvurdering)	- valideret og usikkerhedsvurderet model - partikelbane simulering - stoftransport simulering	type 0 og type 1 eller type 3 afhængigt af dynamik i grundvandssystem og klima / vandindvinding
	Bestemmelse af ansvarlige parter til en given grundvandspåvirkning	- valideret og usikkerhedsvurderet model - partikelbane simulering - stoftransport simulering	vand: type 3A eller 3B nitrat: type 3C
Forudsigelse af fremtidige forhold (the future)	Forvaltning af vandressourcen	- valideret og usikkerhedsvurderet model - superposition - partikelbane simulering - stoftransport simulering	vand : type 3A eller 3B nitrat: type 3C

10.6 INITIALBETINGELSER OG TIDSSKRIDT

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 specificering 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.

Metoder til fastlæggelse af initialbetingelser

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.

Metoder til indkøring af model

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 10.3.

Tabel 10.3 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 for flow og 10-20 år for trykniveau (ved opstart fra stationær model og trykniveau evt. lidt kortere)

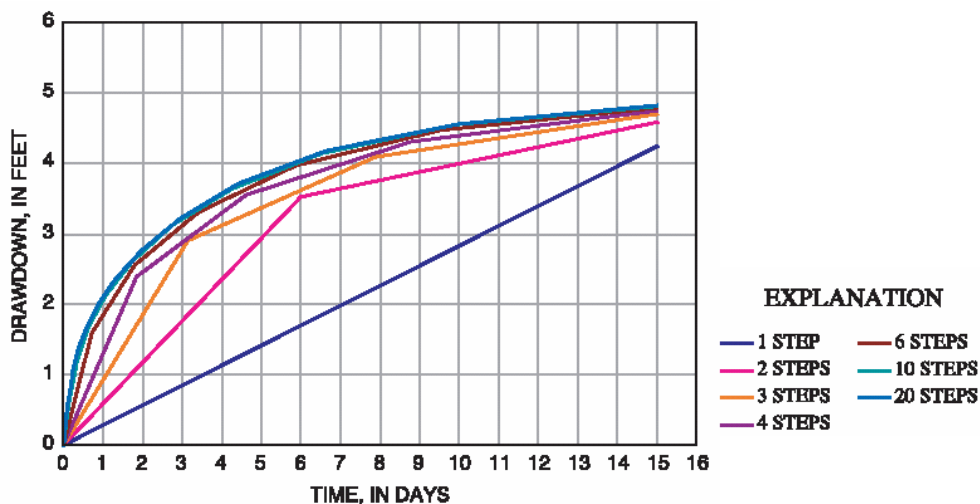
*angivelse af den ”magasinering”, der er i systemet (i mm pr m trykniveau ændring) før modellen ændres fra startværdierne til værdier, der er i hydraulisk balance med randbetingelserne. Det er en noget arbitrær størrelse og vil variere fra model til model samt internt i hver enkelt model.

Bestemmelse af startværdiernes indflydelse i den konkrete modelopsætning

Startværdiernes indflydelse kan 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.

Tidlig diskretisering

En passende tidlig diskretisering af den dynamiske grundvandsmodel (type 1 eller 3) er nødvendig såfremt de numeriske beregninger skal have en rimelig nøjagtighed (USGS, 2004). I figur 10.2 er vist betydningen af valg af antal tidsskridt for simulering af afsenkning af grundvandet efter start af en vandindvinding.



Figur 10.2 Simuleret afsenkning (drawdown) mod tid i dage for forskellige antal tidsskridt. Bemærk at tidsskridtet i eksemplet forøges med 50 % i hvert step.

Brug af 6 eller flere tidsskridt giver en acceptabel simulering af det 15 dage lange afsænkingsforløb. Ofte vil tidsskridt på f.eks. daglig basis være et fornuftigt valg for grundvandsdelen. Overfladevandsdelen (f.eks. MIKE 11) vil ofte skulle køres med meget finere tidsskridt.

10.7 REFERENCER

Ajami, N.K., Gupta, H., Wagener, T. and Soroosh, S. (2004) Calibration of a semi-distributed hydrologic model for streamflow estimation along a river system.

Allerup, P., Madsen, H. og Vejen, F. (1998) Standardværdier (1961-90) af nedbørskorrekationer. Teknisk rapport 98-10. Danmarks Meteorologiske Institut.

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

Butts, M.B., Payne, J.T., Kristensen, M. and Madsen, H. (2004) An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. Journal of Hydrology 298, 242-266.

Bøgh, E., Butts, M., Hansen, S. og Søgaard, H. (2003) Satellitbilleder til modellering af vandbalance. Vand & Jord, 10. årgang nr. 2, maj 2003. p. 72-76.

Camp Dresser McKee Inc. (2001) Evaluation of integrated surface and groundwater modeling tools. February 2001.

Granat, H. (2000) Jordbunden i Landskabet. Skov og Naturstyrelsen, Miljøministeriet.

Guo, J., Liang, X. and Leung, L.R. (2004) Impacts of different precipitation data sources on water budgets. Journal of Hydrology 298, 311-334.

Henriksen, H.J. og Sonnenborg, A. (2003) Ferskvandets Kredsløb. NOVA 2003 temarapport. GEUS, DJF, DMU og DMI.

Henriksen, H.J., Trolborg, L., Nyegaard, P., Sonnenborg, T.O., Refsgaard, J.C. and Madsen, B. (2003) Methodology for construction, calibration and validation of a national hydrological model for Denmark. Journal of Hydrology (280) 52-71.

Henriksen, H.J. og Nyegaard, P. (2003) Den konceptuelle vandmodel – ferskvandets kredsløb (1). Geologisk Nyt 5/03.

KVL, DHI, Watertech, Danmarks Jordbrugsforskning og Dansk Landbrugsrådgivning (2003) Standardopstillinger til Daisy modellen. Vejledning og baggrund.

Liang, X. and Xie, Z. (2003) Important factors in land-atmosphere interactions: surface runoff generations and interactions between surface and groundwater. Global and planetary change 38, 101-114.

Middlemis, H. (2004) Benchmarking best practice for groundwater flow modelling. The Winston Churchill Memorial Trust of Australia. 13. December 2004.

Panday, S. and Huyakorn, P.S. (2004) A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow. Advances in Water Resources 27, 361-382.

Plauborg, F., Refsgaard, J.C., Henriksen, H.J., Blicher-Mathiasen, G. og Kern-Hansen, C. (2002) Vandbalance på mark- og oplandsskala. Notat udarbejdet af DJF, GEUS, DMU, DMI. DJF rapport 70. Markbrug.

Refsgaard, J.C. and Henriksen, H.J. (2004) Modelling guidelines – terminology and guiding principles. *Advances in water resources*. (27) 71-82.

Refsgaard, J.C., Henriksen, H.J., Harrar, W.G., Scholten, H. and Kassahun, A. (2004) Quality assurance in model based water management –review of existing practice and outline of new approaches. *Environmental Modelling & Software* (in press).

Sonnenborg, T.O., Christensen, B.S.B., Nyegaard, P., Henriksen, H.J. and Refsgaard, J.C. (2003) Transient modeling of regional groundwater flow using parameter estimates from steady-state automatic calibration. *Journal of Hydrology* 273, 188-204.

Storstrøms Amt (2003) Regional strømningsmodel for Lolland – Hydrogeologisk model. DHI, Institut for vand og miljø.

Sundberg, P.S. (red) I. Callesen, M.H. Greve og K. Raulund-Rasmussen (1999): Danske jordbundsprofiler. DJF, Foulum.

USGS (2004) Guidelines for evaluating ground-water flow models. Scientific Investigation Report 2004-5038. U.S. Department of the Interior. U.S. Geological Survey. By Thomas E. Reilly and Arlen W. Harbaugh. Reston, Virginia.

van der Keur, P., Hansen, S., Schelde, K., and Thomsen, A. (2001) Modification of Daisy SVAT model for potential use of remotely sensed data. *Agricultural and Forest Meteorology* 106, 215-231.

Vestsjællands amt (2003) Indsatsområde Tude å. Fase 2: Detalkortlægning. Numerisk strømningsmodel. Sammenfattende rapport. Februar 2003.

Århus amt (2002) Grundvandsmodel for Norddjursland. Modelopstilling. December 2002. WaterTech a/s.

Kapitel 11 SKALAFORHOLD OG HETEROGENITET

Torben Obel Sonnenborg og Karsten Høgh Jensen
Geologisk Institut, Københavns Universitet

Nøglebegreber: Geostatistik, effektive parametre, skalaafhængighed opskalering, variabilitet i trykniveau, nøjagtighedskriterier.

ABSTRACT: Ved opstilling af grundvandsmodeller er det afgørende for opnåelse af en troværdig model, at størrelsen og variationen af det hydrauliske trykniveau specificeres korrekt. Det er derfor nærliggende at udnytte tilgængelig information om målinger af hydraulisk trykniveau, når modellen parametriseres. Det kan imidlertid være problematisk at anvende målte værdier af hydraulisk ledningsevne direkte i modellen, da den hydrauliske ledningsevne er skalaafhængig. Kapitlet præsenterer resultater fra litteraturen, der dels dokumenterer denne skalaafhængighed, dels fremkommer med en mulig model for den hydrauliske ledningsevnes afhængighed af skalaen. Desuden anvises der metoder til beregning af den effektive hydrauliske ledningsevne baseret på enkeltmålinger, hvor den effektive ledningsevne er den homogene værdi af hydraulisk ledningsevne der resulterer i den mest korrekte reproduktion af strømmingen i et grundvandsmagasin, hvor småskala-heterogeniteterne ikke eksplicit beskrives i modellen. Endelig præsenteres en metode, hvorpå størrelsen af afvigelserne mellem observeret og simuleret trykniveau, som skyldes ikke modelleret heterogenitet, kan estimeres. Denne information er vigtig i forbindelse med opstilling af nøjagtighedskrav til grundvandsmodellen, idet heterogenitet som der ikke er gjort rede for eksplicit i modellen vil give anledning til en signifikant del af den samlede forventede afvigelse mellem observeret og simuleret trykniveau.

11.1 INDLEDNING

Geologisk heterogenitet har afgørende indflydelse på simulering af både grundvandsstrømning og –transport. Det er f.eks. velkendt, at jo større heterogenitet et grundvandsmagasin er karakteriseret ved, des sværere er det at opnå god overensstemmelse mellem observeret og simuleret trykniveau. Desuden vil spredningen af opløste blive større med stigende heterogenitet. Der kan differentieres mellem forskellige typer af heterogenitet, og i det efterfølgende vil det generelt blive antaget, at det er heterogeniteten indenfor facies, der analyseres. Variabiliteten i geologiske enheder antages at kunne karakteriseres vha. indikator-baserede statistiske metoder (f.eks. T-Progs, Carle & Fogg, 1997), men da der i praktiske problemstillinger normalt er foretaget en geologisk analyse, hvor de dominerende facies er identificeret og kortlagt, vil der her blive fokuseret på at karakterisere variationen i hydrogeologiske parametre indenfor de enkelte hydro-facies.

Indenfor grundvandshydrologi beskrives heterogeniteten vha. nogle hydrauliske parametre, hvor den hydrauliske ledningsevne, K , er den dominerende. Darcy's lov beskriver sammenhængen mellem K og det hydrauliske trykniveau. Når K varierer, vil gradienten dh/dx alt andet lige også variere. For at kunne genskabe de observerede variationer i den hydrauliske gradient, er det nødvendigt at kunne reproducere et realistisk billede af fordelingen af K . Det kræver imidlertid information om, hvordan K varierer rumligt i grundvandsmagasinet, og denne information er normalt ikke til stede. Derfor må man ofte modellere et heterogent grundvandsmagasin som et "effektivt" medium, hvor K antages at være homogen. Herved introduceres uvilkårligt fejl, og disse fejl vil resultere i modellens manglende evne til at genskabe et nøjagtigt billede af det hydrauliske trykniveau i det pågældende magasin (såkaldt prediktionsfejl). Størrelsen af prediktionsfejlen afhænger naturligvis af, hvordan den geologiske heterogenitet er fordelt i grundvandsmagasinet.

Det er derfor vigtigt at kvantificere den geologiske heterogenitet både mht. karakter og størrelsen. Til dette formål anvendes normalt traditionelle statistiske redskaber, hvor størrelser som f.eks. middelværdi og varians af den hydrauliske ledningsevne bestemmes. For at beskrive den rumlige karakter af den geologiske heterogenitet benyttes geostatistik, hvorved det er muligt at kvantificere, hvordan K varierer rumligt. Erfaringsværdier fra danske grundvandsmagasiner mht. kvantificering af den geologiske heterogenitet er relativt begrænset. Det er gennemført nogle få undersøgelser i forbindelse med punktkildeforureninger, hvor den rumlige fordeling af den hydrauliske ledningsevne er velbestemt. På oplandsskala er der imidlertid sparsomt med litteratur om, hvordan K varierer. Det er imidlertid vigtigt at opnå erfaringsværdier for den geologiske heterogenitet på forskellige skalaer, da heterogeniteten afhænger af skalaen. På poreskala vil de enkelte korn have forskellig størrelse og dermed vil åbningerne, hvor igennem vandet kan strømme, være forskellige, hvilket resulterer i variation i strømningshastighed og -retning. På lidt større skala vil der indenfor en given geologisk enhed, f.eks. sand, kunne findes forskellige fraktioner af sandet (finsand, mellem-sand, grovsand), som vil give anledning til forskellige K -værdier. For endnu større skala vil heterogeniteten være domineret af kontrasterne mellem forskellige geologiske formationer, f.eks. moræneler og smeltevandssand. Det er derfor vigtigt at tage skalaen, hvorpå man arbejder, med i betragtning. Det gælder også i forbindelse med målinger af f.eks. den hydrauliske ledningsevne, som vil være afhængig af jordvolumenet, der inddrages i målingen (f.eks. slugtest, korttidsprøvepumpning, langtidspøvepumpning).

I det følgende vil de ovenstående problemstillinger blive beskrevet i flere detaljer. Efterfølgende vil sammenhængen mellem størrelsen af den geologiske heterogenitet og evnen til at simulere et sådant heterogent magasin blive beskrevet. De mere teoretiske udledninger og resultater vil blive illustreret gennem relativt simple eksempler, hvor effekten af den geologiske heterogenitet vil blive kvantificeret.

11.2 GEOSTATISTISK KARAKTERISERING AF GEOLOGISKE HETEROGENITET

En af de mest anvendte metoder til karakterisering af geologisk heterogenitet er geostatistik, som er udviklet til at beskrive den rumlige struktur af naturlige variable såsom hydrogeologiske parametre.

Grundlæggende betragter geostatistikken observerede værdier af geologiske parametre som realisationer af en stokastisk proces. Den pågældende variabel eller parameter er derfor en stokastisk variabel Y , med middelværdi μ_Y og varians σ_Y^2 .

$$\mu_Y = E\{Y\} \quad (11.1)$$

$$\sigma_Y^2 = Var\{Y\} = E\{(Y - \mu_Y)^2\} \quad (11.2)$$

Den hydrauliske ledningsevne K har i praksis ofte vist sig at følge en log-normalfordeling (Hoeksema & Kitanidis, 1985). Derfor vil variabelen $Y = \ln K$ være normalfordelt, og da en normalfordelt variabel er fuldkommen karakteriseret ved dens middelværdi og kovariansfunktion foretages transformationen $Y = \ln K$ i praksis næsten altid.

Den rumlige variabilitet kan beskrives vha. autokovariansfunktionen $Cov\{Y(x), Y(x+h)\}$, hvor h er forskydningsvektoren, hvis størrelse svarer til afstanden mellem to steder, hvor Y evalueres. Autokovariansfunktionen $Cov\{Y(x), Y(x+h)\} = Cov\{x,h\}$ er givet ved

$$Cov\{x,h\} = E\{[Y(x) - \mu_Y][Y(x+h) - \mu_Y]\} \quad (11.3)$$

Autokovariansfunktionen beskriver, hvordan Y varierer i rummet relativt til sig selv. Jo større kovariansværdi, des større korrelation. Hvis $Cov\{x,h\} = 0$ er der ingen korrelation mellem Y i punkterne x og $x+h$, mens der for $Cov\{x,h\} = \sigma_Y^2$ er en perfekt korrelation mellem Y i punkterne x og $x+h$. Hvis μ_Y er konstant, siges Y at være første ordens stationær. Hvis også $Cov\{x,h\}$ er konstant, dvs. ikke varierer med x , er Y også anden ordens stationær og $Cov\{x,h\} = Cov\{h\}$.

Den rumlige korrelationsstruktur kan alternativt beskrives vha. semi-variogrammet $\gamma(h)$

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \text{Var}\{Y(x) - Y(x+h)\} = \frac{1}{2} E\{[Y(x) - Y(x+h)]^2\} \quad (11.4)$$

som er et mål for den kvadrerede forskel på observationer som funktion af afstanden mellem observationer. For en given afstand $h = h_1$, vil γ øges med stigende forskel mellem værdierne af Y i hhv. lokaliteten x og $x+h_1$. Hvis der antages anden orden stationaritet gælder følgende sammenhæng mellem semi-variogrammet og autokovariansfunktionen, $\gamma(h) = \text{Cov}(0) - \text{Cov}(h)$, hvor $\text{Cov}(0) = \sigma_Y^2$. semi-variogrammet går med andre ord fra $\gamma(0) = 0$ til $\gamma(h \rightarrow \infty) = \sigma_Y^2$.

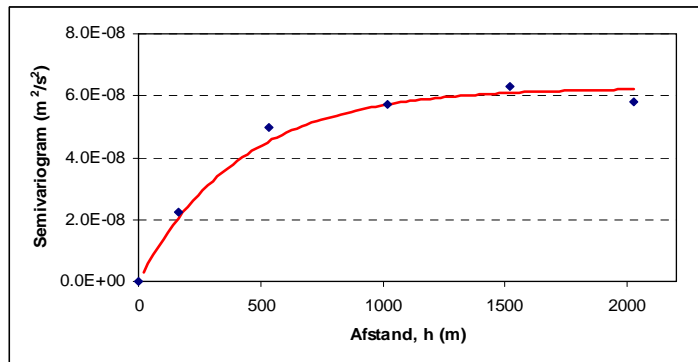
Variogrammet estimeres ud fra målinger af K (eller transmissiviteten T), som antages at være tilgængelig i et antal der gør en statistisk analyse meningsfuld. I praksis defineres et antal klasser af afstande, f.eks. 0-1 km, 1-2 km, osv. For hvor klasse vil der findes N_1 par af observationer, der ligger med en indbyrdes afstand svarende til den pågældende klasse. Den gennemsnitlige afstand mellem observationspar i den pågældende klasse beregnes (h_1), og middelværdien af $\frac{1}{2}(Y_i - Y_j)^2$ beregnes og plottes mod den gennemsnitlige afstand h_1 . På figur 11.1 ses et eksempel på et eksperimentelt variogram.

Siden det er formålet med en geostatistisk analyse at uddrage information om de hydrogeologiske parametres struktur, er det hensigtsmæssigt at tilpasse en matematisk model til det eksperimentelle variogram. Der findes en række forskellige model-variogrammer, men her vil kun den mest almindeligt anvendte indenfor hydrogeologien blive præsenteret, det såkaldte eksponentielle semivariogram

$$\gamma^*(h) = a_1 + a_2 \left[1 - \exp\left(-\frac{h}{\lambda}\right) \right], \quad h > 0 \quad (11.5)$$

hvor a_1 er nugget effekten, som kan skyldes diskontinuitet i semivariogrammet for $h = 0$ og/eller småskalavariabilitet, som ikke fanges på den undersøgte skala. F.eks. vil K -observationer baseret på prøvepumpningsresultater ikke kunne kvantificere variabiliteten på en skala mindre end influensradius for prøvepumpningerne. $a_1 + a_2$ kaldes for sill og betegner variogramværdien for store afstande, hvor der ikke nogen korrelation i data ($a_1 + a_2 = \sigma_Y^2$). Afstanden, hvor sill nås, betegnes range, som er lig 3λ . λ angiver korrelationslængden, som er den afstand, hvor korrelationen er lig $e^{-1} \approx 0.37$. Kvalitativt kan korrelationslængden betragtes som den afstand indenfor hvilken der er stærk korrelation mellem K -værdier, mens range angiver den afstand, udenfor hvilken K ikke længere er korreleret.

På figur 11.1 ses en geostatistisk analyse af hydraulisk lednings-evnedata bestemt ud fra prøvepumpningstests i Danien-kalken i et område på Østsjælland. Korrelationslængden er bestemt til $\lambda = 410$ m, svarende til at data stort set er ukorrelerede for afstande større end $h = 3\lambda = 1230$ m. Da nugget effekten er nul, svarer sill til variansen på K , som kan aflæses til $6.25 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}^2$. Standard afvigelsen er dermed givet ved $\sigma_K = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$.



Figur 11.1 Semivariogram-analyse af hydraulisk ledningsevne. Punkterne angiver det eksperimentelle variogram. Det eksponentielle model-variogram har følgende parametre: Korrelationslængde $\lambda = 410$ m, sill = $6.25 \cdot 10^{-8}$ m²/s². Da nugget effekten er lig nul er sill = σ_K^2 .

Det skal nævnes, at der kan forekomme anisotropi i variogrammet, dvs. at der opnås forskellige resultater, hvis der foretages en retnings-specifik analyse. Der vil i det tilfælde kunne estimeres korrelationslængder i tre principale retninger, λ_1 , λ_2 og λ_3 . Pga. lagdeling vil der ofte kunne antages isotropi i horisontal retning ($\lambda_1 = \lambda_2$), mens der vil være forskel på korrelationslængderne i horisontal og vertikal retning ($\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$), hvilket data præsenteret i det efterfølgende afsnit vil illustrere.

11.3 OBSERVATIONER AF GEOLOGISKE HETEROGENITET

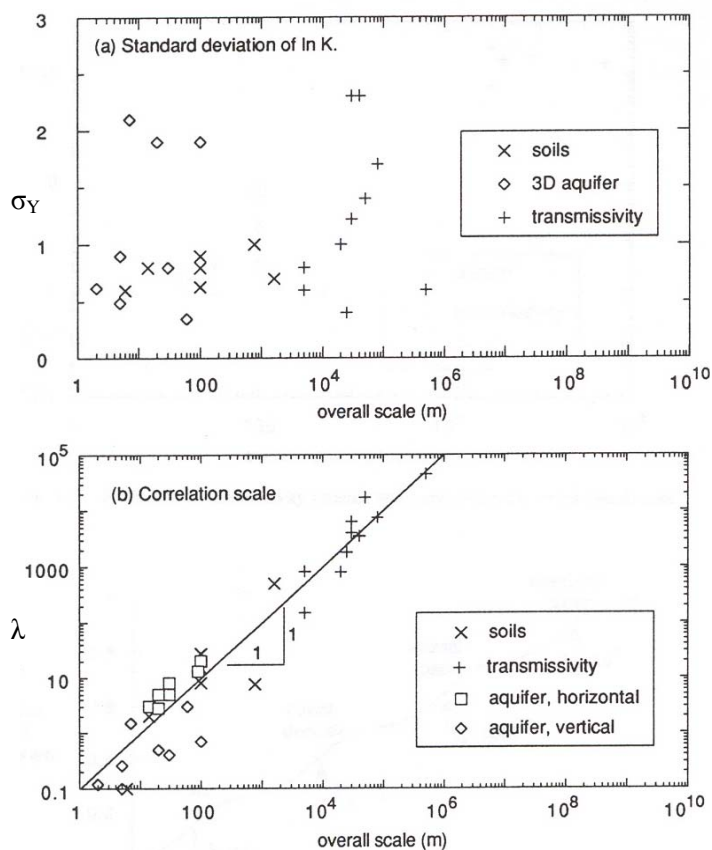
Gelhar (1993) har samlet et stort datasæt om de geostatistiske egenskaber for hydrauliske parametre, se tabel 4.1. Standardafvigelsen på $\ln K$ (eller $\ln T$) falder generelt i intervallet $0.5 \leq \sigma_Y \leq 2.5$, og der ses ikke nogen tendens til, at σ_Y er skalaafhængig, se figur 11.2. Korrelationslængderne i specielt horisontal retning varierer meget. For transmissivitetsdata findes korrelationslængder i størrelsesorden 10^2 til 10^4 m, mens der for infiltrationsundersøgelserne og lokale tre-dimensionale aquiferundersøgelser findes meget mindre horisontale korrelationslængder, typisk i størrelsesorden 10 m. Den statistiske anisotropi (forholdet mellem horisontal og vertikal korrelationslængde) ligger hovedsageligt i intervallet 10 – 40, hvilket er et udtryk for mere eller mindre grad af lagdeling i de undersøgte aflejringer.

Table 11.1 Standard afvigelse og korrelationslængde for lnK (eller lnT) for en række formationer (fra Gelhar, 1993).

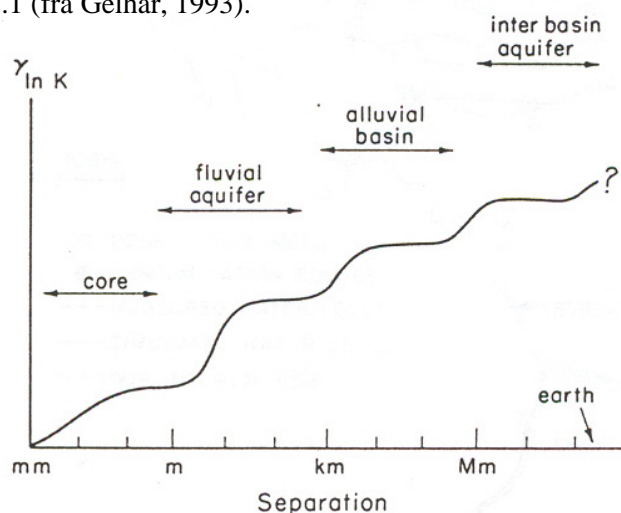
Medium	σ_Y (m)	Korrelationslængde (m)		Skala for undersøgelse (m)	
		Horisontal	Vertikal	Horisontal	Vertikal
<i>Transmissivitetsdata (dybdeintegrerede observationer baseret på pumpetests)</i>					
Alluvialt magasin	0.6	150		5000	
Alluvialt magasin	0.8	820		5000	
Alluvialt bassin	1.0	800		20000	
Alluvialt magasin	0.4	1800		25000	
Alluvialt bassin	1.22	4000		30000	
Kalkmagasin	2.3	6300		30000	
Kalkmagasin	2.3	3500		40000	
Sandstensmagasin	1.4	17000		50000	
Skrivekridtsmagasin	1.7	7500		80000	
Sandstensmagasin	0.6	$4.5 \cdot 10^4$		$5 \cdot 10^5$	
<i>Jord (baseret på observationer af infiltrationsrater på jordoverfladen)</i>					
Alluvialt silt-ler blandet jord	0.6	0.1		6	
Shale underjord	0.8	< 2		14	
Prærie jord	0.6	8		100	
Rød middelhavs jord	0.4 – 1.1	14 - 39		100	
Alluvial jord	0.9	15		100	
Fluvial jord	1.0	7.6		760	
Groft sandblandet lerjord	0.7	500		1600	
<i>Tre-dimensionale aquiferdata</i>					
Fluvialt sand	0.9	> 3	0.1	14	5
Glacial-lacustrine sand magasin (Borden, Canada)	0.6	3	0.12	20	2
Glacial smeltevandsaflejring (Cape Cod, USA)	0.5	5	0.26	20	5
Glacial smeltevandsaflejring	0.8	5	0.4	30	30
Eolisk sandstensblotning	0.4	8	3	30	60
Fluvialt sand og grus magasin (Columbus, USA)	2.1	13	1.5	90	7
Sand og grus aflejring	1.9	20	0.5	100	20
Sandstensmagasin	1.5 – 2.2		0.3 – 1.0		100

De horisontale korrelationslængder har tendens til at være skalaafhængige. Dette ses tydeligere på figur 11.2, hvor hhv. standardafvigelsen og korrelationslængden er plottet mod undersøgelsesskalaen. Korrelationslængderne følger pænt den indlagte rette linie, som svarer til at korrelationslængden er lig 1/10 af undersøgelsesskalaen. Gelhar (1993) forklarer denne skalafhængighed i korrelationslængden med, at der på forskellige skalaer findes forskellige typer af heterogenitet, som hver vil resultere i en sill-værdi i en geostatistisk analyse, se figur 11.3. Med øget skala vil der typisk blive integreret over flere typer af heterogenitet. F.eks. vil det på regional skala (10-100 km) være forskellen mellem facies (f.eks. smeltevandssand og marint aflejret sand), der dominerer en analyse af heterogeniteten, mens det på lokal skala (100-1000 m) vil være heterogeniteten indenfor facies, der er afgørende.

Antallet af danske undersøgelser af den geostatistiske fordeling af den hydrauliske ledningsevne er begrænset. I tabel 11.2 er en række data samlet.



Figur 11.2 Standardafvigelse og korrelationslængde for $\ln K$ afbildet mod undersøgelsesskala for data fra tabel 11.1 (fra Gelhar, 1993).



Figur 11.3 Mulig model for korrelationslængdens skalaafhængighed (fra Gelhar, 1986).

Tabel 11.2 Standardafvigelse og korrelationslængder for danske formationer.

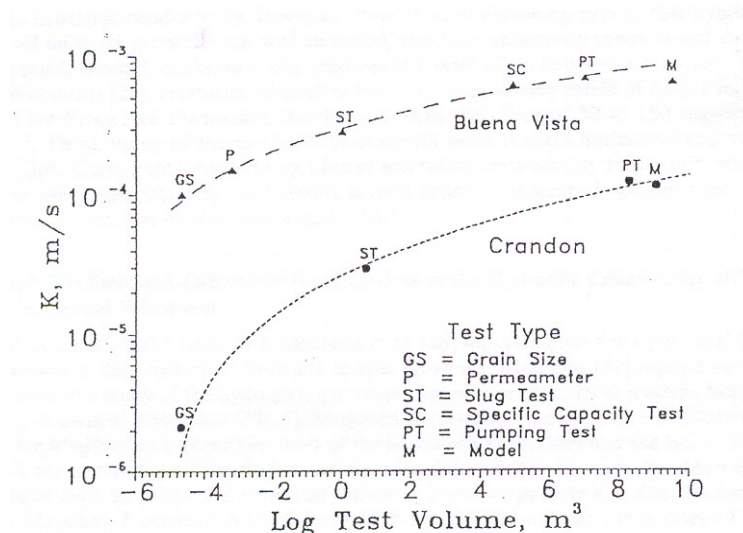
Medium	σ_Y (m)	Korrelationslængde (m)		Skala for undersøgelse (m)	
		Horisontal	Vertikal	Horisontal	Vertikal
<i>Transmissivitetsdata (dybdeintegrerede observationer baseret på pumpetests)</i>					
Danien-kalk*	1.0	410		10000	
<i>Jord (permeameter test på 100 cm³ prøver)</i>					
Morænelandskab, Tåstrup (Hansen et al., 1986)	1.9	< 1		100	
Alluvial smeltevandsaflejring, Jyndevad (Hansen et al., 1986)	0.6	8 – 15		100	
<i>Tre-dimensionale aquiferdata (baseret på slug tests)</i>					
Vestskoven** (Christiansen, 1998)	2.3	1.2	0.4	40	4
Glacial smeltevandsaflejring, Vejen (Højberg, 2001)	0.48	5.0	0.31	50	5
Glacial smeltevandsaflejring, Vejen (Bjerg et al., 1992)	0.60	1 – 2.5		50	
Glacial smeltevandsaflejring, Grindsted (Petersen, 2000)	1.1	3	0.3	50	5

* Baseret på transmissivitetsdata i Greve-området.

** K værdier baseret på kornstørrelsesanalyser af jordprøver.

11.4 SKALA-FORHOLD I HYDRAULISK LEDNINGSEVNE

Detaljerede undersøgelser af den hydrauliske ledningsevnes skalaafhængighed er først blevet gennemført for relativt nyligt (f.eks. Bradbury & Muldoon, 1990; Rovey & Cherkauer, 1995; Shulze-Makuch & Cherkauer, 1998). Disse undersøgelser viser, at K varierer med måleskalaen, og at der er en generel tendens til, at K øges med stigende skala, se figur 11.4.



Figur 11.4 Den hydrauliske ledningsevnes skalaafhængig for to geologiske medier (Bradbury & Muldoon, 1990).

Den samme tendens er konstateret i en dansk undersøgelse af morænelersaflejringer ved Ringe på Fyn (Nilsson et al., 2001). Fredericia (1990) sammenligner mættet hydraulisk ledningsevne bestemt ved forskellige laboratorium- og felt-metoder for danske moræneaflejringer, og finder en lignende trend, som tilskrives tilstedeværelsen af sprækker. Schulze-Makuch & Cherkauer (1998) har vist, at skalaafhængigheden ikke skyldes måle-metoderne, der anvendes på forskellige skalaer (f.eks. slug test, prøvepumpningstest), men er en reel fysisk egenskab ved heterogene medier. Følgende type model er blevet foreslået til beskrivelse af K 's afhængighed af skala (Neuman, 1994; Schulze-Makuch, 1999)

$$K = cV^m, \quad V \leq V_m \tag{11.6}$$

hvor V er volumen af geologisk materiale, der er inkluderet i målingen, m er en skaleringssekspont og c er en konstant, der teoretisk set beskriver den hydrauliske ledningsevne for $V=0$, dvs. en punktmåling. Prøvevolumenet for de enkelte metoder, der anvendes til karakterisering af hydraulisk ledningsevne, er anført i tabel 11.3.

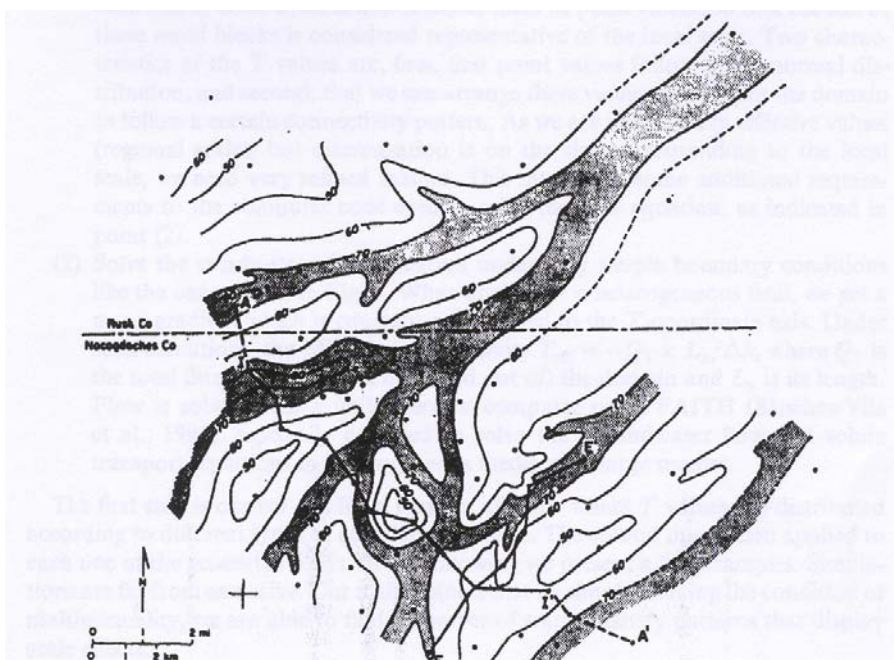
Sánchez-Vila et al. (1996) har foreslået en teori, der forklarer, hvorfor den hydrauliske ledningsevne stiger med skalaen, hvorpå der måles. De anfører, at skala-effekterne i de fleste tilfælde skyldes tilstedeværelsen af høj-permeable zoner, der er forbundet med hinanden. I opsprækkede medier udgøres de høj-permeable zoner af sprækkerne, som via skæringer mellem sprækkeplaner kan være forbundet over store afstande. I porøse medier forventer Sánchez-Vila et al. at eksistensen af høj-permeable zoner er mere reglen end undtagelsen. Som eksempel henviser de til Fogg (1990), der beskriver et fluvialt aflejringsmiljø som bestående af en lav-permeabel matrix med et høj-permeabelt sandet kanalnetværk indbygget, se figur 11.5. Generelt forventer forfatterne derfor, at fluviale aflejringsystemer vil have høj-permeable zoner, der er forbundet langs palaeo-kanalerne, som pga. deres natur vil være velforbundne. Punkt-målinger af K fra systemet vist i figur 4.3 kan meget vel vise sig at være log-normalfordelte, men korrelationsstrukturen kan ikke beskrives ved et enkelt variogram. Høje K -værdier vil have større korrelationslængder end lave K -værdier, og variogrammet vil derfor afhænge af K , $\gamma = \gamma(h,K)$.

Sánchez-Vila et al. (1996) viser i 2D numeriske eksempler, at den effektive hydrauliske ledningsevne er større end den geometriske middelværdi i heterogene K -felter med høj grad af konnektivitet af de høj-permeable zoner. Schulze-Makuch & Cherkauer (1998) forklarer skalaafhængigheden i prøvepumpningstests med den konceptuelle model vist i figur 11.6. Den største del af modelområdet udgøres af et relativt lav-permeabelt materiale, hvori der er indlejret nogle høj-permeable zoner. I et sådant system er det mest sandsynligt, at en tilfældigt placeret boring er filtersat i den lav-permeable matrix, som illustreret med boring P1 i figur 11.6. I starten af prøvepumpningstesten måles en lav hydraulisk ledningsevne, men efter et stykke tid inkluderer indvindingsoplandet også nogle højpermeable zoner (som eventuelt er forbundet i et tre-dimensionalt netværk). Den målte hydrauliske ledningsevne vil derfor stige, når større volumener af magasinet påvirkes af indvindingen.

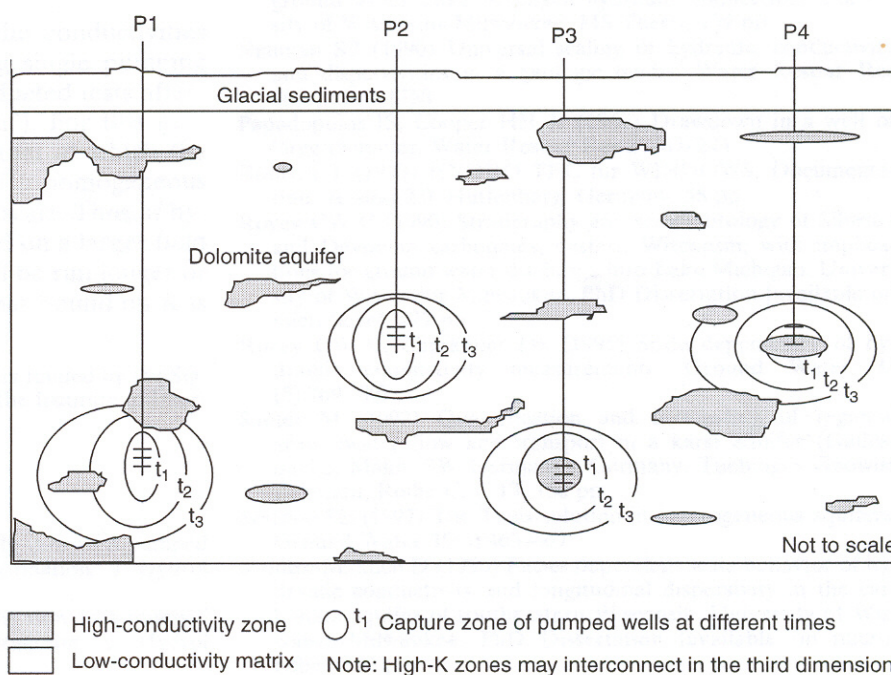
Tabel 11.3 Udregning af prøvevolumen for forskellige målemetoder (efter Schulze-Makuch et al., 1999).

Test metode	Volumen, V
Permeameter	V_s
Piezometer test (slug test)	V_w/n_e
Pakker test	V_w/n_e
Specifik kapacitets test	Qt/n_e
Prøvepumpningstest	Qt/n_e
Tracer test	V_p/n_e
Infiltrationstest	$L_r L_t B$
Numeriske strømningssmodeller	$L_r L_t B$

V_s er volumen af prøven
 V_w er volumen af vand tilført eller fjernet
 n_e er den effektive porøsitet
 Q er pumperaten
 t er tiden
 V_p er volumen af fjernet til tiden, hvor den advective front ankommer
 L_r er strømningsafstand
 L_t er transversal spredningsafstand ($=L_r/10$)
 B er tykkelsen af den geologiske enhed



Figur 11.5 Konturplot af sandindholdet i et område i Texas. De mørk-skrevrede områder udgør høj-permeable velforbundne områder. Fra Fogg (1990).



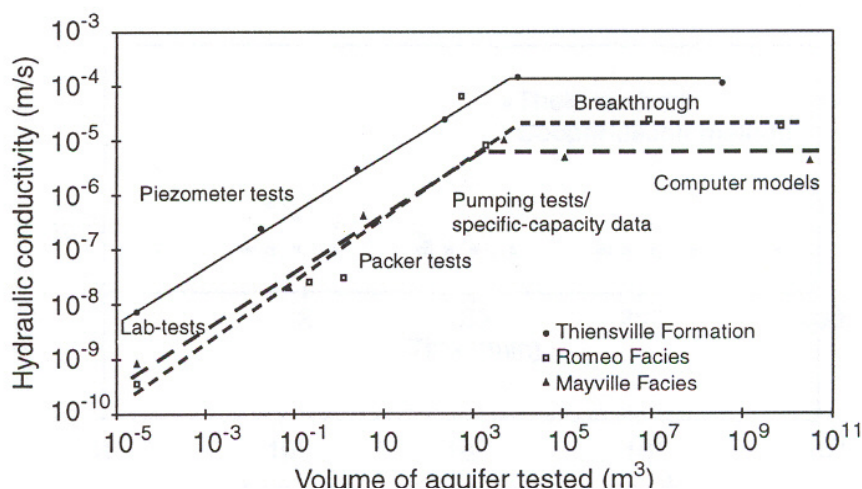
Figur 11.6 Konceptuel model for heterogenitet i porøse medier. De høj-permeable zoner kan være forbundet i den tredje dimension (fra Schulze-Machus & Cherkauer, 1998).

I en omfattende analyse af målinger af den hydrauliske ledningsevne fra 39 forskellige formationer fandt Schulze-Makuch et al. (1999) frem til følgende parametre for forskellige typer af hydrogeologiske medier, se tabel 11.4.

Tabel 11.4 Middelværdier af parametre i relationen (4.6) baseret på eksperimentelle data. N angiver antallet af undersøgte geologiske formationer. c angiver K for $V \approx 1 \text{ m}^3$ (fra Schulze-Makuch et al., 1999).

Nr.	Type	N	m	c (m/s)	V_m (m ³)
1	Heterogent porøst medium	8	0.51	$7.9 \cdot 10^{-6}$	$>1 - >10^5$
2	Dobbelt-porøst medium	16	0.72	$5.0 \cdot 10^{-7}$	$>50 - 10^6$
3	Sprække-strømning	7	0.96	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$>1 - 2 \cdot 10^4$
4	Kanal-strømning	4	0.90	$7.9 \cdot 10^{-8}$	$>10^3 - >10^9$

Type 1 medium dækker over ukonsoliderede sandaflejringer samt konsoliderede bjergarter som f.eks. dolomit. Type 2 medier inkluderer ukonsoliderede bjergarter såsom opsprækket moræneler og heterogene aflejringer med veludviklede lag og linser af sand. Desuden konsoliderede bjergarter som lagdelte dolomitter, "packstone", samt kalk med tynde mergellag. Type 3 medier repræsenterer opsprækkede, konsoliderede bjergarter med lav matrix porøsitet og permeabilitet som "shales", "mudstones" og krystallint dolomit. Type 4 medier inkluderer konsoliderede karbonatbjergarter, hvor sprækkerne kan være blevet udvidet af f.eks. opløsningsprocesser, så der opstår kanaler i sprækkerne. Prøvepumpningstest i denne type af hydrologisk medium udviser, ligesom type 3 medier, et retliniet trykrespons i et log-log plot.



Figur 11.7 Eksempler på skala-afhængigheden for porøst medium facies samt de tilhørende modeller af typen givet ved ligning (4.5). Fra Schulze-Makuch & Cherkauer (1998).

Analysen af skalaafhængigheden viser, at for porøse, ikke-opsprækkede, medier er $m \approx 0.5$ (se figur 11.7), mens den for medier domineret af sprække-strømning er tæt på 1.0. For de dobbelt-porøse medier findes en værdi midt imellem på ca. 0.75. For hver enkelt type af medium er m uafhængig af den geologiske aflejrings variabilitet, f.eks. udtrykt ved variansen på $\ln K$ (σ_Y^2). Værdien af m er ligeledes uafhængig af, om der er tale om et konsolideret eller ukonsolideret medium.

Værdien af c afhænger af det pågældendes mediums hydrauliske ledningsevne på punktskala, hvilket i praksis vil sig på den mindste skala, hvor der er udført hydrauliske tests.

Den øvre grænse, hvor udtryk (11.6) gælder og over hvilken skala-afhængigheden ophører, afhænger af heterogeniteten af mediet. I medier med høj variabilitet skal der dermed inddrages et stort volumen af formationen, før en konstant værdi af K findes, mens der for relativt homogene medier hurtigt findes en hydraulisk ledningsevne, som vil være repræsentativ for en større skala.

Iversen et al. (2001) undersøgte skalaafhængigheden i en analyse af fire områder i Danmark (ler-blandet sand områderne Silstrup og Estrup, samt sandområderne Jyndevad og Tylstrup). I alle fire områder blev der indsamlet prøver på hhv. 100 cm^3 og 6280 cm^3 , hvorpå der bl.a. blev målt mættet hydraulisk ledningsevne. For de to heterogene jordtyper (Silstrup med σ_Y på 1.44 og 1.14 for hhv. små og store prøver, og Estrup med σ_Y på 1.56 og 1.58 for hhv. små og store prøver) blev der fundet en skalaafhængig, som understøtter analysen af Schulze-Makuch et al. (1999), med m -værdier på hhv. 0.48 og 0.62. For de to relativt homogene områder (Jyndevad med σ_Y på 0.43 og 0.45 for hhv. små og store prøver, og Tylstrup med σ_Y på 0.82 og 0.48 for hhv. små og store prøver) blev der ikke fundet nogen skala-afhængighed, hvilket kan skyldes, at den øvre grænse for gyldigheden af udtryk (11.6) allerede er nået ved en prøvestørrelse på 100 cm^3 , hvilket stemmer godt overens med, at de to områder er relativt homogene.

11.5 EFFEKTIV HYDRAULISK LEDNINGSEVNE

Heterogenitetens indflydelse på grundvandsstrømning og –transport har været undersøgt af mange forskere og der er publiceret en omfattende mængde artikler om emnet (f.eks. Freeze, 1975; Bakr et al., 1978; Gutjahr et al., 1978; Dagan, 1979; Gelhar & Axness, 1983). I det følgende vil der fortrinsvis blive taget udgangspunkt i L.W. Gelhars stokastiske arbejde, f.eks. (Gelhar, 1993).

Graden og karakteren af rumlig variabilitet i den hydrauliske ledningsevne er af afhørende betydning for grundvandsstrømning og –transport. Der er to spørgsmål, som har haft stor bevågenhed siden midten af 1970'erne: (1) Hvordan bestemmes en ækvivalent (effektiv) hydraulisk ledningsevne, som kan repræsentere den integrerede effekt af et heterogent medium, og (2) hvordan forplanter usikkerhed i hydraulisk ledningsevne sig til usikkerhed i hydraulisk trykniveau. I dette afsnit vil det første spørgsmål blive adresseret, mens spørgsmål 2 vil blive behandlet i næste afsnit. Det er imidlertid den samme metode og de samme antagelser, der anvendes til at analysere begge spørgsmål, og disse vil blive præsenteret her.

For at svare på ovenstående spørgsmål er der blevet anvendt forskellige stokastiske metoder, hvor den såkaldte perturbationsmetode har været en af de mest succesfulde til at producere generelle analytiske udtryk, som umiddelbart kan anvendes i praksis. I perturbationsmetoden repræsenteres det hydrauliske trykniveau h og den hydrauliske ledningsevne K (eller $Y = \ln K$) ved deres middelværdi og perturbationer

$$\begin{aligned} h &= H + h' ; & E\{h'\} &= 0 \\ Y &= \bar{Y} + Y' ; & E\{Y'\} &= 0 \end{aligned} \tag{11.7}$$

Ved indsættelse af ovenstående for h og $\ln K$ i strømningsligningen er det muligt at udlede udtryk for hhv. middeltrykniveauets afhængighed af middel hydrauliske ledningsevne

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^2} + \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{Y}}{\partial x_i} = 0 \tag{11.8}$$

og sammenhængen mellem trykniveauets perturbationer h' og $\ln K$'s perturbationer Y'

$$\frac{\partial^2 h'}{\partial x_i^2} + \frac{\partial \bar{Y}}{\partial x_i} \frac{\partial h'}{\partial x_i} = - \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial Y'}{\partial x_i} \tag{11.9}$$

Den stokastiske partielle differentiaalligning (11.9), som relaterer inputtet Y' til outputtet h' , er udledt under antagelse af, at perturbationerne Y' er små.

Der findes forskellige metoder til at løse (11.9). En af de mest succesfulde er den spektrale metode, Gelhar (1986), men også andre metoder som f.eks. den såkaldte Greens funktion metode, Dagan (1986, 1989), har været anvendt. Perturbationsmetoden er approksimativ, da det antages, at fluktuationerne Y' er relativt små. Desuden er det nødvendigt at introducere en række antagelser, for at kunne gennemføre analysen, som inkluderer stationær strømning i medier af uendelig udstrækning, hvor igennem der foregår en strømning med middel hydraulisk gradient J . Desuden forudsættes det, at $\ln K$ kan beskrives som en normalfordelt stationær stokastisk funktion.

Vha. den spektrale perturbationsmetode kan den effektive hydrauliske ledningsevne for medier af forskellige geostatistiske egenskaber bestemmes. Den effektive hydrauliske ledningsevne kan defineres vha. Darcy's lov

$$q_i = -K \frac{dh}{dx_i} \quad (11.10)$$

Tages middelværdien af Darcy-ligningen fås

$$E\{q_i\} = -K_{eff} E\left\{\frac{dh}{dx_i}\right\} = K_{eff} J, \quad J = -E\left\{\frac{dh}{dx_i}\right\} \quad (11.11)$$

Hele konceptet omkring en effektiv hydraulisk ledningsevne bygger på, at der kan defineres en K_{eff} , så ligning (11.11) er opfyldt. For stationær, planparallel strømning er dette tilfældet, og værdien af K_{eff} afhænger bl.a. af, om det betragtede problem er 1, 2, eller 3-dimensionalt.

Baseret på resultater af Gutjahr et al. (1978) foreslog Gelhar & Axness (1983) følgende generelle formel for den effektive hydrauliske ledningsevne i medier med isotrop korrelationsstruktur

$$K_{eff} = K_g \exp\left[\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{D}\right)\sigma_Y^2\right] \quad (11.12)$$

hvor D er antallet af dimensioner, hvori strømmingen foregår, og K_g er den geometriske middelværdi, der kan estimeres som

$$K_g = \exp\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln K_i\right) \quad (11.13)$$

Det ses af (11.12), at K_{eff} stiger med antallet af dimensioner D . I det to-dimensionale tilfælde ($D=2$) fås det simple udtryk $K_{eff} = K_g$.

Gelhar & Axness (1983) fandt også et udtryk for den effektive ledningsevne i tre-dimensionale medier med anisotropisk korrelationsstruktur ($\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$)

$$K_{eff,ii} = K_g \exp\left[\left(\frac{1}{2} - g_{ii}\right)\sigma_Y^2\right], \quad i = 1,2,3 \quad (\text{ingen sum over } i) \quad (11.14)$$

hvor $0 \leq g_{ii} \leq 1$ er givet ved et relativt langt udtryk, der afhænger af forholdet mellem korrelationslængden hhv. parallelt med og vinkelret på stratificeringen (λ_1/λ_3). I tabel 11.5 ses g_{11} og g_{33} for forskellige forhold af λ_1/λ_3 . Desuden er forholdet mellem den effektive hydrauliske ledningsevne og den geometriske ledningsevne angivet. Det ses, at ledningsevnen parallelt med stratificering ($K_{eff,11}$) stiger, når forholdet mellem korrelationslængderne øges, svarende til stigende grad af stratificering.

Tabel 11.5 Værdier af g_{11} og g_{33} samt $K_{\text{eff},11}/K_g$ og $K_{\text{eff},33}/K_g$ ($\sigma_Y^2 = 1$) i udtryk (11.14) som funktion af λ_1/λ_3 .

λ_1/λ_3	g_{11}	g_{33}	$K_{\text{eff},11}/K_g$	$K_{\text{eff},33}/K_g$
1	0.33	0.33	1.19	1.19
2	0.24	0.53	1.30	0.97
10	0.07	0.86	1.54	0.70
100	0.008	0.98	1.64	0.62

Det modsatte gør sig gældende for $K_{\text{eff},33}$. For et perfekt lagdelt medium ($\lambda_1/\lambda_3 \rightarrow \infty$) fås $g_{11} = 0$ og $g_{33} = 1$. I dette tilfælde er den effektive ledningsevne parallel med lagdelingen altså givet ved

$$K_{\text{eff},11} = K_g \exp\left(\frac{1}{2}\sigma_Y^2\right) \quad (11.15)$$

Da $\exp(1/2\sigma_Y^2) > 1$ for fysisk realistiske værdier af σ_Y^2 , vil den effektive hydrauliske ledningsevne parallelt med lagdeling for det anisotrope medium være større end i det to-dimensionale tilfælde, hvor $K_{\text{eff}} = K_g$. Udtrykket (11.15) svarer til den aritmetiske middelværdi af K .

Strømning i virkelige grundvandsmagasiner er tre-dimensional, men ofte behandler man grundvandsmagasinerne, som om de var to-dimensionale, dvs. der benyttes ét numerisk lag til at repræsentere dem, og den hydrauliske ledningsevne forudsættes homogen over dybden af magasinet. Ved prøvepumpningstests er det normalt transmissiviteten, der fastlægges, hvor transmissiviteten er et dybdeintegreret mål for magasinets vandføringsevne. I bedste fald karakteriseres den horisontale variabilitet i K , mens der stort set aldrig er data til rådighed til at belyse den vertikale variation i K . Vertikal heterogenitet bliver eventuelt kvantificeret vha. en anisotropifaktor, der oftest er svær at estimere, og normalt fastlægges ud fra en antagelse om en vis lagdeling i magasinets opbygning. Mht. observationer af trykniveauet står man normalt også i den situation, at trykniveauets variation over dybden af magasinet ikke kan kortlægges, da der kun er foretaget en enkelt måling af h på den pågældende lokalitet. Denne måling kan repræsentere enten et integreret mål for trykniveauet i magasinet, hvis der er tale om et langt filter, eller en mere punktformig information, hvis der måles i et relativt kort filter. I praksis bliver grundvandsmagasiner derfor ofte modelleret som to-dimensionale enheder, specielt hvis der kun fokuseres på strømning. Hvis det antages, at målingerne fra systemet (K og h) hovedsageligt repræsenterer dybdeintegrerede størrelser, vil det være mest korrekt, at benytte resultaterne fra analysen af 2D grundvandsstrømning til at kvantificere den effektive hydrauliske ledningsevne ($K_{\text{eff}} = K_g$).

Vha. ligning (11.12) eller (11.14) beregnes den homogene K -værdi, der strømningsmæssigt repræsenterer et område af en vis størrelse, og som vil kunne anvendes i en numerisk model. Det er imidlertid en forudsætning, at de lokale K -værdier, hvorpå den statistiske analyse baseres, er repræsentative for den skala, hvorpå der modelleres. Formel (11.12) og (11.14) er ikke ”opskalingsudtryk”, hvor man får parametre ud til brug på regional skala, hvis man sætter parametre ind, der er fundet på lokal skala (se afsnit 4.4). Hvis der modelleres på en skala, der er større end V_m (hvor K er uafhængig af skala for $V > V_m$), bør K -værdier målt på en skala, der er mindre end V_m principielt set opskaleres vha. udtryk (11.6) inden de anvendes som basis for beregning af effektive ledningsevner. Ved brug af de effektive hydrauliske ledningsevner sikres derefter, at fluksen gennem det betragtede område bliver lig middelfluksen gennem det tilsvarende heterogene magasin, dvs. at ligning (11.11) er opfyldt.

11.6 EFFEKTEN AF GEOLOGISK HETEROGENITET PÅ TRYKNIVEAU

Den hydrauliske ledningsevne, K , afhænger kraftigt af undergrundens geologiske opbygning. F.eks. vil sand have en ledningsevne, der er flere størrelsesordener højere end ledningsevnen for ler. I praksis tilstræbes det at opbygge hydrogeologiske modeller, så den rumlige geometri af de

forskellige hydrostratigrafiske enheder, også benævnt hydrofacies, kortlægges. Men selv hvis det er muligt præcist at beskrive den rumlige placering og geometri af de forskellige hydrofacies, der forekommer i et område, vil variationen i K stadig ikke være fuldt beskrevet. Det er velkendt, at K varierer inden for den enkelte hydrofacies, f.eks. en smeltevandsaflejrning. Pga. mangelfuld information om variationen i K indenfor facies, beskrives magasinet i praksis ofte vha. en zoneringsstrategi, hvor det opdeles i et endeligt antal (ofte få) enheder eller zoner, indenfor hvilke den hydrauliske ledningsevne antages at være konstant. Små-skala undersøgelser som f.eks. lossepladsundersøgelserne ved Vejen (Bjerg et al., 1992; Højberg, 2001) og Grindsted (Petersen, 2000) har vist, at K varierer over selv ganske korte afstande, og det er derfor evident, at zoneringsmetoden ikke kan reproducere den sande trykniveaufordeling indenfor de enkelte zoner, da variationen i K ikke, på det foreliggende datagrundlag, kan beskrives. Ved passende valg af K for den enkelte zone kan det imidlertid forventes, at middeltrykniveauet kan beskrives, men småskalavariationerne i h vil ikke blive reproduceret. Når modellen kalibreres vil der med andre ord blive fundet en afvigelse mellem observeret og simuleret trykniveau, der kan kvantificeres vha. f.eks. en RMS-værdi. Det vil derfor være interessant at kvantificere, hvor stor denne afvigelse kan forventes at være, og at belyse hvilke faktorer der har indflydelse på dens størrelse.

Da grundvandsmagasiner på oplandsskala ofte behandles som to-dimensionale systemer (ingen variation af K over dybden af magasinet, h-observationer repræsenterer hele magasinets tykkelse, ofte benyttes ét numerisk beregningslag til at repræsentere et grundvandsmagasin), vil der her kun blive refereret resultater fra analysen af to-dimensionale strømningssystemer med isotrop korrelationsstruktur. I dette tilfælde kan der udledes følgende udtryk for variansen på det hydrauliske trykniveau (Gelhar, 1993)

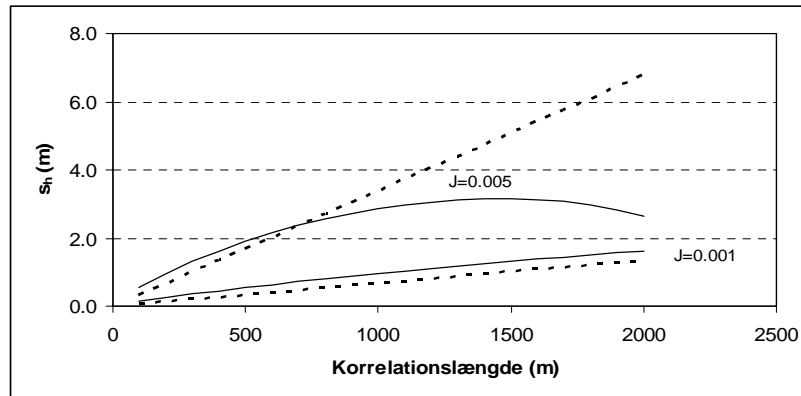
$$\sigma_h^2 = C \sigma_{\ln K}^2 \lambda^2 J^2 \tag{11.16}$$

hvor C er en koefficient, som afhænger af strømningssystemet. Udtrykket viser, at variansen på trykniveauet afhænger ligeligt af variansen på $\ln K$, korrelationslængden λ og middelgradienten på trykniveauet J. I tabel 11.7 ses, hvorledes koefficienten C afhænger af systemet der analyseres. Mens C er konstant og uafhængig af systemets egenskaber for et artesisk magasin, afhænger C af både magasinets tykkelse B, middelgradienten J og korrelationslængden for $\ln K$ for et frit magasin.

Tabel 11.7 Koefficienten C i udtryk (11.16). B er tykkelsen af det frie magasin, J er middelgradienten, og λ er korrelationslængden.

Strømningssystem	C
2D artesisk	0.46
2D frit	$0.37 \ln[1.21B/(J\lambda)]$

På figur 11.8 ses den beregnede standard afvigelse på trykniveauet for varierende værdier af korrelationslængden og den hydrauliske gradient (konstant σ_y^2). For et artesisk magasin med en korrelationslængde på 500 m og en middelgradient på 0.001 fås eksempelvis en $s_h = 0.34$ m. Kurven for det frie magasin for $J = 0.005$ viser en faldende tendens for høje korrelationslængder. Dette skyldes, at teorien, som ligning (11.16) bygger på, er approksimativ, og derfor giver fejlagtige resultater for kombinationer af høj gradient og korrelationslængde.



Figur 11.8 Standard afvigelse på trykniveauet beregnet vha. 11.15 for hhv. 2D artesisk (stiplet linie) og frit magasin (fuldt optrukken linie). $\sigma_Y^2 = 1$, $B = 10$ m.

Hvis variansen på trykniveauerne skal give information om, hvor stor en RMS-værdi, der kan forventes for det pågældende system, skal der opstilles en relation mellem s_h^2 og RMS. Residualen mellem observeret og simuleret trykniveau er givet ved

$$r_h = h_{obs} - h_{sim} \tag{11.17}$$

og middelværdien af residualerne findes til

$$\mu_r = E\{r_h\} \tag{11.18}$$

$$\hat{\mu}_r = ME = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_{hi} \tag{11.19}$$

Variansen på trykresidualerne er givet ved

$$\sigma_h^2 = Var\{r_h\} = E\{r_h^2\} - \mu_r^2 \tag{11.20}$$

der kan estimeres vha. følgende udtryk

$$\hat{\sigma}_h^2 = s_h^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_{hi}^2 - ME^2 \tag{11.21}$$

RMS-værdien beregnes vha. følgende udtryk

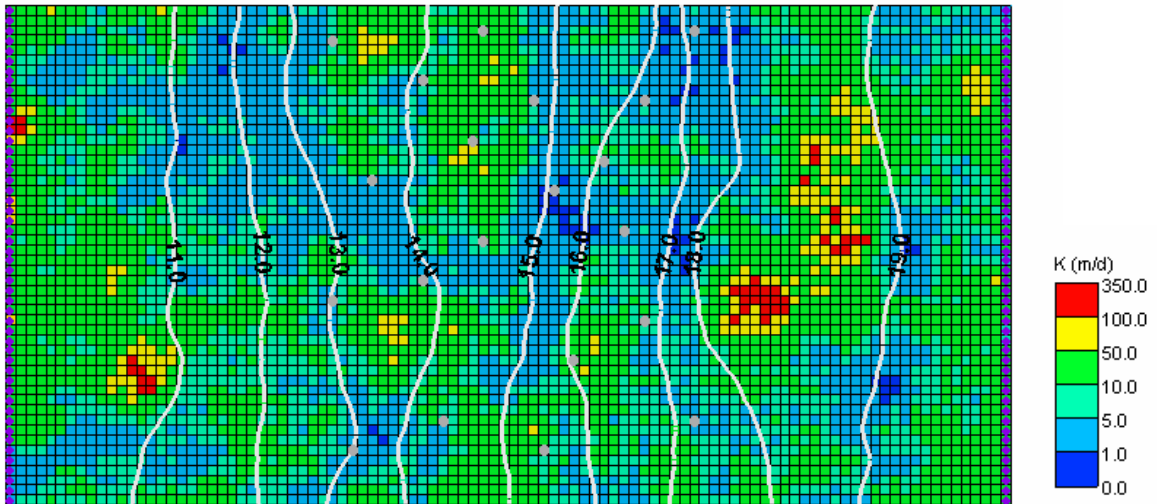
$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_{hi}^2} \tag{11.22}$$

Indsættes udtrykket for RMS i udtryk (11.21) fås

$$s_h^2 = RMS^2 - ME^2 \tag{11.23}$$

Det ses af ovenstående udtryk, at hvis $ME = 0$, er s_h og RMS lig hinanden. I alle andre tilfælde vil RMS-værdien være større end s_h .

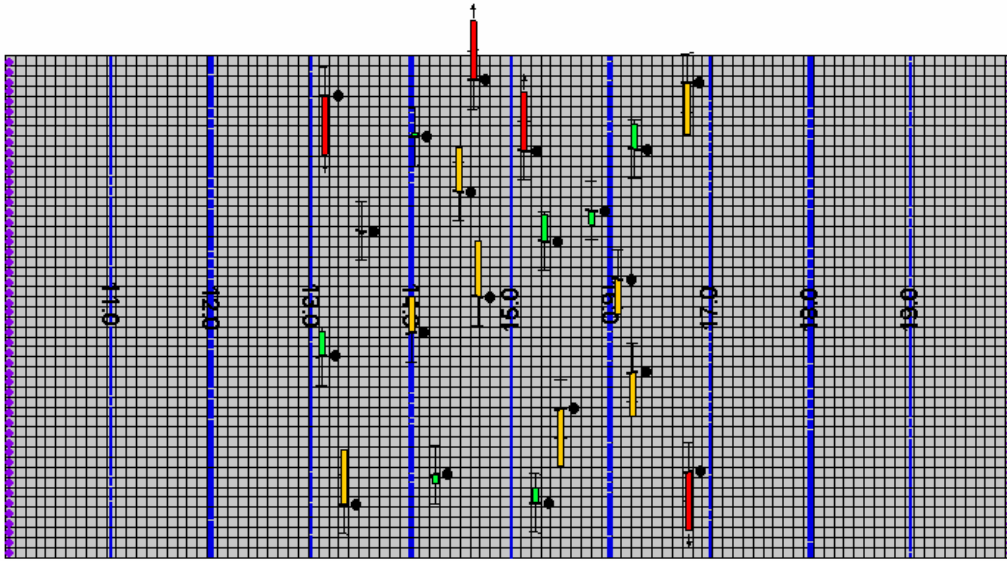
For at teste, hvor godt de approksimative analytiske udtryk udledt af Gelhar og andre estimerer usikkerheden på trykniveauet, er der udført et numerisk eksempel. Et to-dimensionalt rektangulært strømingsdomæne med sidelængderne 10 x 5 km er diskretiseret med celler af størrelsen 100 x 100 m. Randbetingelserne består i vestlig ende af fastholdt tryk på 10 m og i østlig ende af fastholdt tryk på 20 m. Mod nord og syd er der impermeable rande. Vha. metoden udviklet af Frenzel (1995) er der genereret en realisation af den hydrauliske ledningsevne med en geometrisk middelværdi på $1 \cdot 10^{-4}$ m/s, en varians på $\ln K$ på 1, og en korrelationslængde på 500 m. På figur 11.9 ses den resulterende fordeling af den hydrauliske ledningsevne.



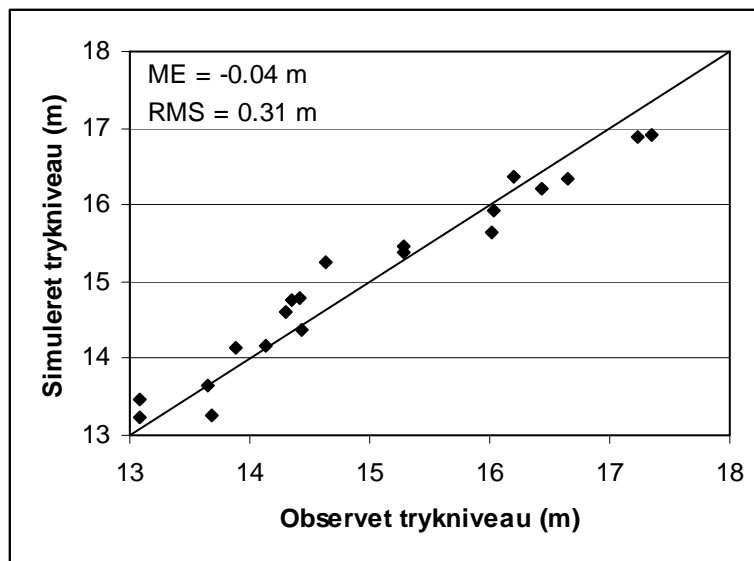
Figur 11.9 Fordeling af hydraulisk ledningsevne samt den resulterende fordeling af hydraulisk trykniveau.

Efterfølgende er der vha. MODFLOW2000 fundet en strømningsløsning for problemet, hvor det antages at være et artesisk magasin. Den resulterende trykniveaufordeling ses også på figur 11.9. Der er defineret 20 observationspunkter i den midterste del af området (for at undgå for store påvirkninger fra de fastholdte tryk rande), og det simulerede trykniveau er noteret. Herefter er det samme modelsetup simuleret ved anvendelse af en homogen hydraulisk ledningsevne i hele domænet på $1 \cdot 10^{-4}$ m/s. Resultatet ses på figur 11.10, hvor de 20 observationspunkter kan identificeres. Usikkerheden på de "observerede" trykniveauer er arbitrært sat til $s_h = 0.1$ m. Den GMS producerede figur over afvigelserne illustrerer residualer, der ligger indenfor $\pm 2s_h$ ved en grøn søjle, mellem $\pm 2s_h$ og $4s_h$ som en gul søjle og over $\pm 4s_h$ som en rød søjle. Der ses at være en relativ jævn fordeling af afvigelserne over det betragtede område.

Figur 11.11 viser et scatterplot, hvor residualerne ligeledes ses at være rimeligt fordelt. Der beregnes en ME = -0.04 m og en RMS = 0.310 m. Standard afvigelsen på trykresidualerne beregnes vha. (11.21) til 0.307 m, hvilket ses at være meget tæt på estimatet på 0.34 m opnået vha. udtryk (11.16). Effekten af den ikke modellerede heterogenitet i hydrauliske ledningsevne kan altså kvantificeres vha. det approksimative analytiske udtryk.



Figur 11.10 Hydraulisk trykniveaufordeling og afvigelse mellem observeret og simuleret trykniveau.



Figur 11.11 Observeret mod simuleret trykniveau. Den rette linie angiver perfekt simulering.

I en kalibreringssituation vil man konkludere, at modellen er kalibreret optimalt, hvis der opnås en afvigelse mellem observeret og simuleret trykniveau, der svarer til værdien beregnet vha. formel (11.16), forudsat at heterogeniteten i K er den eneste kilde til afvigelser mellem observeret og simuleret trykniveau. Hvis trykniveauet skal simuleres mere præcist, vil det være nødvendigt at opløse og beskrive systemets heterogeniteter.

11.7 DISKUSSION OG OPSUMMERING

Dette kapitel har fokuseret på skalaafhængighed i hydraulisk ledningsevne, K , bestemmelse af effektiv hydraulisk ledningsevne, K_{eff} , og betydningen af heterogenitet i hydrauliske ledningsevne for præcisionen i simulering af hydraulisk trykniveau, h .

Hydraulisk ledningsevne er skalaafhængig op til en vis skala, der kan udtrykkes ved volumen V_m . V_m afhænger af heterogeniteten af det medium, der betragtes, f.eks. udtrykt ved variansen på $\ln K$, $\sigma_{\ln K}^2$. V_m er en stigende (men ikke kendt) funktion af heterogeniteten, $V_m = f(\sigma_{\ln K}^2)$. For et område med stor heterogenitet skal der derfor inddrages et stort volumen, før K kan forventes at være uafhængig af skala ($K(V) = \text{konst.}$). Ved modellering af et givet område skal der benyttes K -værdier, der repræsenterer den skala, som der modelleres på. Hvis der eksempelvis modelleres på markskala ($V \approx 10^5 \text{ m}^3$), skal der ideelt set anvendes værdier for K , der repræsenterer denne skala, hvilket godt kan være mindre end V_m , dvs. punktet, hvor K bliver uafhængig af skalaen. Principielt set kan måleværdier af K skaleres vha. udtryk (11.6), så eksempelvis værdier opnået vha. slug tests kan opskaleres til den ønskede skala. Der er imidlertid usikkerhed på de i indtrykket indgående parametre (m og c), som også afhænger af typen af medium der arbejdes med (enkeltporøst medium, dobbeltporøst medium, etc.), og det er derfor problematisk i praksis at udføre denne opskalering. Det er imidlertid vigtigt at være opmærksom på skalaafhængigheden i den hydrauliske ledningsevne, da K -værdien kan variere betragteligt som funktion af skalaen, se f.eks. figur 11.7. Man skal derfor være påpasselig med at anvende målte K -værdier som input til en grundvandsmodel, enten direkte eller via en a priori værdi til en invers model (se afsnit 14.2.3). Da opskalering kun undtagelsesvist vil være muligt, kan man stille spørgsmålstegn ved, om K -værdier målt ved f.eks. slug tests har nogen værdi for en grundvandsmodel, der opererer på oplandsskala. Da K stiger med stigende skala vil slug tests resultaterne angive en nedre grænse for den hydrauliske ledningsevne i det pågældende magasin. Desuden vil forskellen mellem slug tests resultater opnået i forskellige borer kunne give kvalitativ information om variabiliteten i hydraulisk ledningsevne i magasinet.

K vil altid variere fra punkt til punkt i et virkeligt grundvandsmagasin. I praksis har man imidlertid ikke information om denne kontinuerte variation, og det er derfor nødvendigt at antage homogenitet indenfor mere eller mindre velafgrænsede områder. Hvis der er nogle få målinger af K til rådighed, som forventes at repræsentere den ønskede skala, vil det ofte være ønskeligt på baggrund af disse målinger at kunne beregne en effektiv hydraulisk ledningsevne, som resulterer i en hensigtsmæssig simulering af strømmingen gennem magasinet. Da grundvandsmagasinerne oftest er anisotrope, dvs. har længere korrelationslængde i horisontal retning end i vertikal retning, vil denne beregning normalt skulle foretages vha. ligning (11.14), eller hvis der antages perfekt lagdeling med ligning (11.15). Herved findes en homogen værdi af den hydrauliske ledningsevne som repræsenterer den betragtede enheds (zone, lag) hydrauliske egenskaber.

Når et heterogent grundvandsmagasin modelleres som en homogen enhed, vil der nødvendigvis blive begået en fejl, idet der nogle steder vil blive simuleret et for højt trykniveau og andre steder vil blive simuleret et for lavt trykniveau. Hvis middelværdien af afvigelserne mellem observeret og simuleret trykniveau er tæt på nul, vil det generelt blive betragtet som en acceptabel fremgangsmåde. Spørgsmålet er imidlertid, hvor store afvigelser der i middel kan forventes mellem observeret og simuleret trykniveau i de enkelte målepunkter, dvs. hvor stor RMS-værdi kan der forventes pga. ikke modelleret heterogenitet. Dette har praktisk relevans, når der skal opstilles nøjagtighedskrav til en grundvandsmodel, idet heterogenitet, som ikke kan kortlægges og dermed ikke inkluderes direkte i modellen, vil være årsag til en betydelig del af den samlede afvigelse mellem observeret og simuleret trykniveau. Det er imidlertid muligt at kvantificere denne fejl, hvis der er statistiske informationer til rådighed om den hydrauliske ledningsevne for det modellerede område. Konkret skal der frembringes værdier for variansen og korrelationslængden for $\ln K$, $\sigma_{\ln K}^2$ og λ . Disse værdier kan kun sjældent tilvejebringes for et konkret område, men vha. erfaringsværdier (se tabel 11.2), vil det være muligt at komme med kvalificerede gæt på $\ln K$'s geostatistiske egenskaber. Kombineres dette med typen af magasin der modelleres (frit eller artesisk) og middelgradienten i det modellerede område, J , kan ligning (11.16) anvendes til at beregne et estimat på variansen af den hydrauliske trykniveau omkring middelværdien, σ_h^2 . Middelværdien af trykniveauet er netop det, som

modellen med den homogene hydrauliske ledningsevne vil simulere, hvis den er kalibreret optimalt. Vha. ligning (11.23) kan den estimerede varians oversættes til en forventning om den resulterende RMS værdi.

11.8 REFERENCER

Bakr, A.A., Gelhar, L.W., Gutjahr, A.L., MacMillan, J.R. (1978) Stochastic analysis of spatial variability in saturated subsurface flows, 1. Comparison of one- and three-dimensional flows, *Water Resources Research*, 14(2), 263-271.

Bjerg, P.L., Hinsby, K., Christensen, T.H., Gravesen, P. (1992) Spatial variability of hydraulic conductivity of an unconfined sandy aquifer determined by a mini slug test, *J. Hydrology*, 136, 107-122.

Bradbury, K.R., Muldoon, M.A. (1990) Hydraulic conductivity determinations in unlithified glacial and fluvial materials, *Ground Water and Vadose Zone Monitoring*, ASTM STP 1053, D.M. Nielsen and A.I. Hohnson, Eds., Am. Soc. for Testing and Materials, Philadelphia, 138-151.

Christiansen, J.S. (1998) Reactive solute transport in a physically and chemically heterogeneous aquifer, Ph.D. Thesis. Department of Hydrodynamics and Hydraulic Engineering, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark. pp. 1-178 + appendix. (ISVA Series Paper No. 74) .

Dagan, G. (1979) Models of groundwater flow in statistically homogeneous porous formations, *Water Resources Research*, 15(1), 47-63.

Dagan, G. (1986) Statistical theory of groundwater flow and transport: Pore to laboratory, laboratory to formation and formation to regional scale, *Water Resources Research*, 22(9), 120S-134S.

Fredericia, J. (1990) Saturated hydraulic conductivity of clayey tills and the role of fractures, *Nordic Hydrology*, 21(2), 119-132.

Freeze, R.A. (1975) A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media, *Water Resources Research*, 11(5), 725-741.

Frenzel, H. (1995) A field generator based on Mejia's algorithm. Institut für Umweltphysik, University of Heidelberg, Germany.

Gelhar, L.W. (1986) Stochastic subsurface hydrology from theory to applications, *Water Resources Research*, 22(9), 135S-145S.

Gelhar, L.W. (1993) *Stochastic Subsurface Hydrology*, Englewood Cliffs, NJ, Prentice Hall.

Gelhar, L.W., Axness, C.L. (1983) Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers, *Water Resources Research*, 19(1) 161-180.

Gutjahr, A.L., Gelhar, L.W., Bakr, A.A., MacMillan, J.R. (1978) Stochastic analysis of spatial variability in saturated subsurface flows, 2. Evaluation and application, *Water Resources Research*, 14(5), 953-959.

Hansen, S., Storm, B., Jensen, H.E. (1986) Spatial variability of soil physical properties – Theoretical and experimental analyses, I, Soil properties, Rep. 1201, Dep. of Soil and Water and Plant Nutrition, R. Vet. and Agric. Univ. of Denmark, Copenhagen.

Hoeksema, R.J., Kitanidis, P.K. (1985) Analysis of the spatial structure of properties of selected aquifers, *Water Resources Research*, 21, 563-572.

Højberg, A.L. (2001) Numerical analysis of pesticide migration in field injection experiment, Ph.D. thesis, Series Paper no. 77, Department of Hydrodynamics and Water Resources, Technical University of Denmark.

Iversen, B.V., Moldrup, P., Schjønning, P., Loll, P. (2001) Air and water permeability in differently textured soils at two measurement scales, *Soil Science*, 166(10), 643-659.

Nilsson, B., Sidle, R.C., Klint, K.E., Bøggild, C.E., Broholm, K. (2001) Mass transport and scale-dependent hydraulic tests in a heterogeneous glacial till-sandy aquifer system, *J. Hydrology*, 243, 162-179.

Petersen, M.J. (2000) Modeling of groundwater flow and reactive transport in a landfill leachate plume, Ph.D. thesis, Series Paper no. 73, Department of Hydrodynamics and Water Resources, Technical University of Denmark.

Rovey, C.W. II., Cherkauer, D.S. (1995) Scale dependency of hydraulic conductivity measurements, *Ground Water*, 33(5), 769-780.

Sánchez-Vila, X., Carrera, J., Girardi, J.P. (1996) Scale effects in transmissivity, *J. Hydrology*, 183, 1-22.

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.

Schulze-Makuch, D., Carlson, D.A., Cherkauer, D.S., Malik, P. (1999) Scale dependency of hydraulic conductivity in heterogeneous media, *Ground Water*, 37(6), 904-919.

Kapitel 12 NØJAGTIGHEDSKRITERIER

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Torben Obel Sonnenborg
Geologisk Institut, Københavns Universitet

Nøglebegreber: Modelcyklus, performancekrav, testkørsel, kvalitative og kvantitative performance-mål, observations-datasæt, dokumentation af performance

ABSTRACT: Gennem modelcyklus i arbejdet med udbudsbetingelser, konceptuel model, modelopsætning, kalibrering og validering, udgør definerede krav til modellens nøjagtighed, dvs. performancekrav, et vigtigt instrument for design og analyse af en models nøjagtighed, herunder om modellen vurderes at kunne opfylde de formål, der er stillet for opgaven. Følgende spørgsmål er centrale for design og arbejde med formulering af nøjagtighedskriterier: Hvad skal modellen bruges til? Hvilket kompleksitetsniveau skal modellen designes ud fra? Hvilke ressourcer er der til rådighed og hvilke tidsplaner skal overholdes? I forbindelse med udbudsbetingelser skitseres kravene til modellens performance indledningsvist i form af såvel kvalitative som kvantitative mål. Forskellige typer rådata indgår i modelopstillingen og bidrager til tolkning af konceptuel model og valg af observations-datasæt til kalibrering og validering. Det er karakteristisk, at endelige krav til modellens performance først kan formuleres, når der foreligger en første testkørsel med modellen, hvor udvalgte observations-datasæt er inkorporerede. Herefter er opgaven i kalibreringsprocessen at tilpasse modellen (parametre, struktur, randbetingelser mv.), så slutmodellen overholder de opstillede performancekrav. Efterfølgende valideringstests kan så dokumentere, hvor god modellens performance er i forhold til uafhængige observations-datasæt. Gyldighed og relevans af dokumenteret performance og honorering (eller manglende honorering) skal afslutningsvis vurderes kritisk med henblik på den endelige evaluering af modellens gyldighedsområde og usikkerhed.

12.1 INDLEDNING

Fastlæggelse af nøjagtighedskriterier for et modelprojekt er en vigtig, men også vanskelig opgave. Modellen kan beskrive et antal variable f.eks. trykniveau, flow, koncentration osv., og man skal derfor tage stilling til, hvilken nøjagtighed hver enkelt variabel skal kunne beskrives med. Ofte fastlægger hydrogeologer et sæt kvantitative numeriske nøjagtighedskriterier (RMS, R^2 osv.) med henblik på at klassificere 'godheden' af en given model (Henriksen et al., 2003; Scholten and Van der Tol, 1998). Sådanne bestræbelser er nyttige med henblik på at gøre modellens performance gennemskuelig og kvantitativ, men de siger på den anden side ikke meget om, hvor god modellen egentlig er til at beskrive de formål, der er opstillet, f.eks. evnen til at beskrive grundvandsdannelsen eller vandbalanceforhold (Refsgaard et al., 2004). Undersøgelser med studerende der opstillede grundvandsmodeller fra USA har vist, at der ikke behøver at være nogen direkte sammenhæng mellem succes med hensyn til at matche trykniveauer i kalibreringen og efterfølgende evne til at simulere trykniveau ved ændrede stresspåvirkninger, Freyberg (1988). En god og nøjagtig kalibrering førte dermed ikke nødvendigvis til en god slutmodel eller til pålidelige simuleringer. Ikke fordi modellen ikke kunne matche trykniveauet, men fordi modellens troværdighed (goodness), var noget andet og mere end blot at kunne matche trykniveauet i en kalibreringssituation. Et godt fit mellem observeret og simuleret trykniveau og flow kan derfor højst siges at være et nødvendigt

krav, men ikke et tilstrækkeligt krav, til at bedømme en models kvalitet og nøjagtighed til simuleringsformål. Hvis den konceptuelle model er forkert, så er den samlede numeriske model nok også rimelig forkert, uanset hvor god en performance den så måtte opnå bedømt ud fra kvantitative kriterier. Det er altid relevant at skitsere mulige alternative konceptuelle modeller, og i arbejdet søge at eliminere disse med henblik på at indsnævre den mest troværdige model.

Det er heller ikke muligt at opstille et enkelt sæt universelle performancekrav, idet acceptkriterier for, hvornår en model er god nok, vil variere fra område til område. I takt med at der foretages en mere omfattende dataindsamling og tolkning i forbindelse med udarbejdelse af konceptuel model og modelopsætning opbygges efterhånden en nærmere forståelse for dels en nedre grænse for, hvad der vil kunne opnås med hensyn til nøjagtighed, som bl.a. hænger sammen med kvaliteten af observationsdata og usikkerheden på disse oversat til modelskala. Desuden kan der gives et bud på, hvilke nøjagtighedskrav der er nødvendige for at modellen bliver brugbar til den anvendelse, der er formuleret i udbudsbetingelserne og kravspecifikationer. Den øvre realistiske grænse kan herefter fastlægges som et mål for, hvad modellen skal kunne honorere i kalibrerings- og valideringskørsler. De realistiske performancekrav vil således være stærkt afhængige af de givne hydrogeologiske og hydrologiske forhold for området, heterogeniteten af de geologiske aflejringer, modellens diskretisering, og de processer der modelleres. Samtidig forudsættes en lidt dybere forståelse af kvaliteten af de indsamlede data, betydning af randbetingelser, inputdata, begrænsninger i valgte modelkode osv. før endelige krav til performance kan defineres.

Desuden vil kravene til nøjagtighed afhænge af den socio-økonomiske kontekst, altså hvad der er på spil i relation til et givent performance-niveau for modellen. Økonomi, interessenters præferencer, og risikovillighed spiller alt sammen en rolle for formuleringen af et sæt nøjagtighedskriterier for en grundvandsmodel (Refsgaard og Henriksen, 2004). Vores evne til på baggrund af data at foretage en modelbaseret nøjagtig beskrivelse af et system vokser som funktion af tid, penge, og den tilgængelige tekniske ekspertise (Middlemis, 2004). Derfor er det nødvendigt at moderere kravene til modellens nøjagtighed i forhold til de økonomiske rammer, tid og data der er til rådighed. Der kan ikke gives nogen endegyldig opskrift på, hvordan forskellige kvantitative og kvalitative krav bedst muligt kan balanceres og det afhænger desuden af, hvad modellen skal bruges til. Multiple kriterier, der fokuserer på både vandbalanceforhold, trykniveau og afstrømningsforhold, kan generelt anbefales, idet der herved er større chance for at opnå en troværdig model, som er i stand til at reproducere forskellige aspekter af systemets dynamik.

Det betyder at arbejdet med nøjagtighedskriterier i stedet for at kunne opfattes som et på forhånd givet universelt og objektivi kriterium, må opfattes mere som et resultat af refleksioner og faglige drøftelser undervejs f.eks. ved reviews, dvs. et produkt af en proces, hvor der gradvist i forløbet fastlægges et sæt endelige kriterier, som ikke kun er kvantitative (vandstand, flow, koncentrationer mm.), men også defineres med et kvalitativt indhold (realistiske parametre, dynamik, fordeling af residualer osv.). Som supplement til de kvantitative krav til nøjagtighed er det vigtigt at sikre, at variationer i rum og tid indenfor modelområdet har rimelig nøjagtighed. Dette sker i praksis i form af en formulering af et sæt kvalitative krav til modellen. Eksempler herpå kan være, at der fastsættes krav til de kalibrerede parameterverdier, så det sikres at parameterestimerne er realistiske, at modelstrukturen udgør en plausibel tolkning af geologien og at afvigelser mellem simulerede og målte variable er jævnt fordelt areal- eller dybdemæssigt. Det samme kan gælde tidsserier, hvor en kritisk vurdering af simulerede tidsserier i forhold til observerede altid er et krav. Hvis modellen skal bruges til partikelbanesimuleringer og afgrænsning af indvindingsområder er det særligt vigtigt at have øje for modellens evne til at simulere strømningsretninger, og kvalitative krav herom kunne derfor være naturlige.

Det er vigtigt at være opmærksom på, at der er nogle psykologiske mekanismer i aktion i rollespillet mellem vandressourceforvalter og hydrogeologer, og internt i hydrogeologgruppen. Tidspres og knaphed på ressourcer kan derfor forhindre nøgterne vurderinger af modellens performance. Den kultur (det rollespil) der i praksis styrer et modelprojekt, har derfor betydning for muligheden for kritisk at vurdere den konceptuelle model og designet af modelopsætningen og nøjagtighedskriterier. Eksterne reviews er her særligt nyttige, fordi udefrakommende eksperter vil kunne bidrage med forfriskende kritiske kommentarer til modellens resultater, performance osv., og dermed

forhindre alvorlige fejlfortolkninger af modellens gyldighedsområde og validitet. Der kan være en tendens til at hydrogeologer fokuserer for ensidigt på de kvantitative 'objektive facts' og dermed kommer til at ignorere det, som de ikke ved så meget om.

12.2 INDLEDENDE FASTLÆGGELSE AF NØJAGTIGHEDSKRITERIER I UDBUDSFASE

Den indledende fastlæggelse af nøjagtighedskriterier i udbudsfasen afhænger dels af (1) hvad modellen skal anvendes til (se kapitel 2 Formålet med opstilling af model) og dels af (2) den specificerede jobkompleksitet, altså hvilken detaljeringsgrad, der arbejdes med i modelprojektet. Der kan dels vælges et lavt niveau, dvs. en 'basic model'/screeningsmodel, et mellem niveau dvs. en 'intermediær model'/overslagsberegninger eller højt niveau dvs. en 'comprehensive model'/akvifer simulering.

Disse kravspecifikationer vil normalt være definerede som et led i en ydre planlægningsproces. Modelprojektet kan blot opfattes som et indre loop i denne cyklus. Hvor meget tid og hvor mange penge, der er til rådighed for modelprojektets udførelse, vil afhænge af nogle ydre socio-økonomiske faktorer. Fastlæggelsen af nøjagtighedskriterier for modellen bliver dermed primært et spørgsmål om at finde en rimelig balance mellem på den ene side et ønske om en så detaljeret og nøjagtig model som muligt, og på den anden side, det begrænsede antal ressourcer til at opnå dette mål, der i praksis er til rådighed. Det er særligt vigtigt at prioritere de spørgsmål, som modellen skal give svar på, så det er muligt at styre projektet hen mod de væsentligste behov for stor nøjagtighed. Man kan sige, at modellen 'vinkles' i forhold til hovedopgaven.

Forhold såsom konceptualiseringen af strømningssystemet, som i mange sammenhænge har særdeles stor betydning for modellens egnethed til at kunne belyse et opstillet hovedformål (USGS, 2004), kan måske overses, som følge af for ensidig fokusering på især de kvantitative nøjagtighedskriterier. Problemet er, at man her udelukkende fokuserer på den statistiske usikkerhed i stedet for at rette søgelyset mod det, som er sværere at kvantificere (scenariesusikkerhed, erkendt uvidenhed, se kapitel 19). I visse tilfælde vil det måske være mere optimalt at formulere en alternativ konceptuel model frem for at tvinge parametrene i den aktuelle konceptuelle model til at antage urealistiske værdier for at være i stand til at opfylde de kvantitative kalibreringskriterier. Pointen er derfor, at man ikke må lægge for meget i opfyldelsen af kvantitative nøjagtighedskriterier alene, hvis de kvalitative forhold ikke samtidig ser ud til at kunne opfyldes.

12.3 MODELOPSTILLING OG OBSERVATIONSDATA

Der er i princippet fire forhold som skal være opfyldte før den ofte tidskrævende kalibreringsproces kan sættes i værk:

1. Der skal være udvalgt et sæt kvalificerede (se afsnit 12.3.3) observationsdata for f.eks. trykniveau og afstrømning. Usikkerheden på observationsdata skal vurderes herunder hvilken maksimal nøjagtighed af værdier svarende til performancekriterier der kan opnås under hensyn til usikkerhed på observationsdata oversat til modelskala.
2. Der skal være udvalgt et sæt kvantitative performancekriterier for overensstemmelsen mellem f.eks. observeret og simuleret hydrauliske trykniveau
3. Som minimum bør et kvalitativt kriterium omkring realistiske parameterværdier defineres, det vil sige der bør produceres en tabel over startgæt på de enkelte frie parametre der kalibreres på og en forventet variationsramme (se tabel 12.6)
4. Der skal være foretaget en testkørsel (f.eks. stationær og dynamisk) for kalibreringsperioden med udtræk af værdier for performancekriterier. Det skal samtidig godtgøres, at der ikke er for meget numerisk støj på modelresultaterne. Det kan i visse tilfælde være nødvendigt at tjekke dette ved at anvende forskellige startgæt eller forskellige inputdata.

I forbindelse med opstillingen af den numeriske model er der en række forhold, der har betydning for den endelige fastlæggelse af nøjagtighedskriterier. Dels kan der fastsættes en nedre grænse for den performance, der vil kunne opnås (den kan jo ikke blive bedre end usikkerheden på data i forhold til modelskala), og dels skal det optimale mål for performance defineres ud fra modelfor-

mål, datakvalitet, skala osv. Indgangen til denne vurdering, som skal give input til kvantitative og kvalitative nøjagtighedskriterier, afhænger derfor af følgende forhold:

1. Kvaliteten af observationsdata (nøjagtighed og præcision af data)
2. Hydrogeologiske forhold (geologisk heterogenitet, usikkerhed på grundvandsdannelse, etc.)
3. Konceptuel model – eller hydrogeologisk tolkningsmodel (randbetingelser, geologisk model, anvendte simplificeringer, etc.)
4. Numerisk kode og modelopsætning (procesbeskrivelser og antagelser, fysiske data for vandløbssystem, grundvandsoppumpning, rumlig og tidlig opløsning af modelområde, m.m.)
5. Kalibrering (hvor godt er de optimale parameter, givet ovenstående ramme, estimeret via kalibreringen)

1) og 2) bestemmer den nedre grænse for, hvor god en overensstemmelse der kan opnås mellem observerede og simulerede variable. 3), 4) og 5) kan (vil) introducere fejl, der kan minimeres og er bl.a. en funktion af de økonomiske rammer for projektet. I det følgende vil der blive fokuseret på kvantificering af 1) kvaliteten af observationsdata. Effekten af hydrogeologisk heterogenitet er behandlet i kapitel 11 Skalaforhold og heterogenitet, mens forhold vedrørende den konceptuelle model, modelopsætning og kalibrering er beskrevet andre steder i håndbogen.

12.3.1 *Typer af observationsdata*

Observationsdata, som betegner målinger af systemets tilstand, f.eks. trykniveauet, strømningsretning eller koncentration, kan typisk karakteriseres ved geografi, frekvens og kvalitet. Geografi kan her betyde målinger i en boring (f.eks. trykniveau repræsenterende koordinater og dybdeinterval), et vandløbspunkt (f.eks. vandføring som egentlig er processeret ud fra vingeprofiler af målt hastighed og registrering af vandstand, der så er omregnet til vandføring ved hjælp af en simpel model, dvs. en QH-kurve) eller vandprøve (f.eks. oppumpet vandmængde fra boringsfilter), som så er analyseret på et laboratorium. Frekvens antyder, at observationsdata enten udgøres af tidsserier eller enkeltobservationer. Der er med andre ord sjældent tale om rådata, men oftest tale om processerede data, som tilmed er sekundære, fordi det ikke er data man selv har været med til at indsamle (primære data). Datakvaliteten og omstændigheder ved dataindsamlingen er derfor kun i begrænset omfang kendte. Kvalitet af data afhænger både af observationsnøjagtighed og i hvor høj grad målingen repræsenterer resultaterne fra modellen.

12.3.2 *Målinger af grundvandets trykniveau*

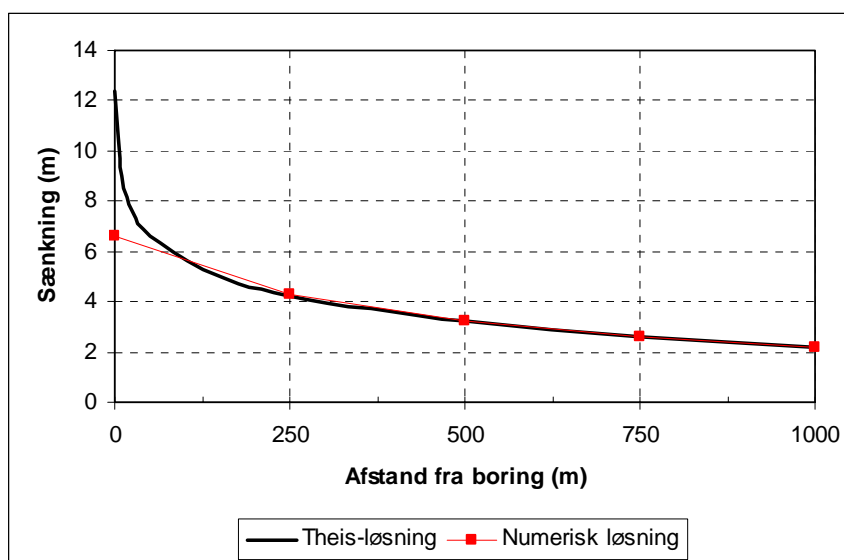
I arbejdet med strømningsmodeller vil det primært være målinger af hydraulisk trykniveau og vandløbsvandføring, der kan inkluderes i kalibreringsprocessen. I sjældne tilfælde vil der også være mulighed for at inddrage målinger af grundvandets alder samt grundvandets strømningsretning og -hastighed. I det følgende behandles udvælgelsen af kalibreringsdata, dvs. hvilke observationer af trykniveau og vandføring, der kan inkluderes i estimationen. Både den tidslige og rumlige fordeling af de tilgængelige observationsdata vil blive behandlet.

Overordnet kan observationer af grundvandets trykniveau inddeles i tidsserier og enkeltmålinger. Tidsserier har generelt højere værdi som kalibreringsgrundlag end enkeltmålinger, selv når der arbejdes med en stationær grundvandsmodel. Det skyldes dels, at den enkelte måling kan relateres til de øvrige målinger i tidsserien, hvilket gør det forholdsvis let at identificere fejlbehæftede målinger. Det kan være svært at udføre et lignende kvalitetscheck på en enkeltmåling, da man ikke har noget at sammenligne målingen med. Desuden kan der på basis af en tidsserie med stor nøjagtighed beregnes en karakteristisk værdi (middelværdi, 25%-fraktil, etc.), som den stationære model kan kalibreres mod. For en enkeltmåling kan det være svært at vurdere, hvor målingen ligger i forhold til f.eks. middeltrykniveauet, hvilket kan introducere fejl ved sammenligning mellem modelresultat og måling. Endelig kan det på baggrund af en tidsserie vurderes, om trykniveauet det pågældende sted har vist tegn på en trend, f.eks. faldende trykniveau pga. generelt stigende grundvandsindvinding. I givet fald udvælges kun målinger fra den periode, som modellen repræsenterer, som kalibreringsgrundlag.

Der foretages løbende målinger af grundvandets trykniveau, grundvandspejlinger, fra en lang række grundvandsboringer landet over, som hver især udgør en tidsserie af trykniveauets variation. GEUS drev fra 1950'erne et nationalt pejlestationsnet bestående af over 100 boringer. Nettet er nu overtaget af amterne. I forbindelse med Vandmiljøplanens grundvandsovervågningsprogram er der siden 1989 foretaget regelmæssige grundvandspejlinger i GRUMO og LOOP-områderne, som tilsammen udgør NOVANA pejlestationsnettet. Desuden er der flere amter, som driver eget pejlestationsnet. Der arbejdes i skrivende stund på at få alle de nævnte tidsserier lagt ind i Jupiter-databasen. I Jupiter findes også kortere eller længere grundvandspejleserier fra større hydrogeologiske projekter som f.eks. Karup-, Suså- og Nordvand-undersøgelserne.

Tidsserierne fra pejlestationsnettene udgør generelt den bedste kvalitet af trykniveaupejlinger, der findes i Danmark. Målingerne foretages som reglen i boringer med en veldefineret filterplacement, og i mange boringer er der installeret flere filtre, så vertikale strømningsforhold kan belyses. Det er tilstræbt at benytte observationsboringer, der er lokaliseret relativt langt fra større vandindvindinger, og som kan derfor antages at være forholdsvist upåvirket af sænkningstragten fra indvindingsboringer. Den tidlige opløsning vil typisk være på månedsniveau, men i nogle tilfælde kan der findes pejleserier, hvor der er målt hver 14. dag, mens der i andre tilfælde vil være udført færre pejlinger.

De større vandforsyninger driver ofte deres eget pejlestationsnet, hvor der foretages løbende observationer af trykniveauet i og omkring deres kildepladser. Men netop den korte afstand til indvindingsboringer gør, at disse målinger tit kan være svære at anvende i en numerisk model. Modellen simulerer sænkningen forårsaget af indvindingen i celler med et relativt stort volumen (f.eks. $250 \times 250 \times 10 \text{ m}^3$), mens målingen foretaget i en boring tilnærmelsesvis repræsenterer et punkt. Problemet er illustreret i figur 12.1, hvor en Theis-løsning er sammenlignet med løsningen fra en numerisk model med horisontal diskretisering på $250 \times 250 \text{ m}^2$. Begge modeller løser for sænkningen omkring en indvindingsboring i et 50 m tykt magasin med en hydraulisk ledningsevne på $1 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$ og et specifikt magasintal på $1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$. Indvindingsraten er på $4000 \text{ m}^3/\text{dag}$, og der ses på løsningen efter 100 dages oppumpning.



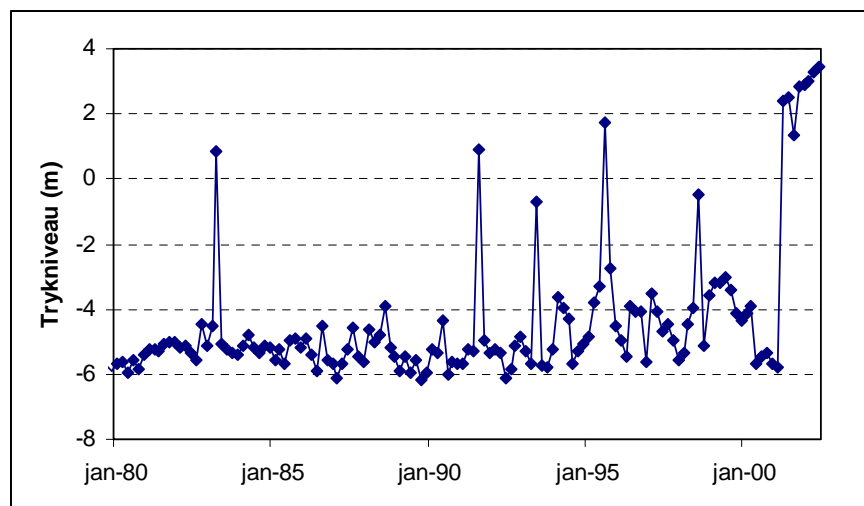
Figur 12.1 Sammenligning af sænkningstragt omkring en indvindingsboring fundet vha. hhv. en Theis-løsning og en numerisk løsning (MODFLOW), hvor der er anvendt en horisontal diskretisering på 250 m.

Fejlen på den numeriske løsning er på under én centimeter 750 m og længere væk fra indvindingsboringen, men stiger til hhv. 3 og 5 cm hhv. 500 m og 250 m fra boringen. I cellen, hvor boringen er placeret, simuleres en gennemsnitligt sænkning, som kan afvige signifikant fra en punktværdi. Theis-løsningen giver en sænkning på 12.4 m i en afstand af 1 m fra indvindingsboringen, hvilket er næsten en dobbelt så stor sænkning som den numeriske model simulerer.

Ovenstående eksempel viser, at observationer af trykniveauet tæt på indvindingsboringer skal anvendes med varsomhed. Det anbefales derfor, at afstanden til den nærmeste indvindingsboring altid bestemmes, og at det vurderes, hvor stor en sænkning der kan forventes i den givne afstand. Hvor egnet de pågældende målinger er som kalibreringsgrundlag for modellen afhænger bl.a. af, hvilken diskretisering der benyttes og dermed hvor godt høje gradienter i nærheden af indvindingsboringen kan reproducere.

Anvendelse af pejlinger fra selve pumpeboringen er endnu mere kritisk. Foruden diskretiseringsfejlen vil et eventuelt filtertab i boringen normalt ikke blive reproduceret i den numeriske model, hvilket vil forværre situationen yderligere. Det må derfor anbefales, at pejlinger fra pumpeboringer i drift anvendes med stor forsigtighed i forbindelse med modelkalibrering og helst helt undgås.

Observationer, der er foretaget tæt på indvindingsboringer, vil også være usikre pga. tidsvarierende indvindingsrater, som typisk ikke er repræsenteret i modellen, hvor der ofte benyttes årlige værdier for indvinding. En pejlning udført på et tidspunkt med lav pumpe-rate vil derfor afvige kraftigt fra en pejlning udført med høj pumpe-rate. Hvis opløseligheden af tidsserien er tilstrækkelig god, vil dette problem imidlertid kunne identificeres visuelt ved plotning af tidsserien, se eksemplet i figur 12.2.



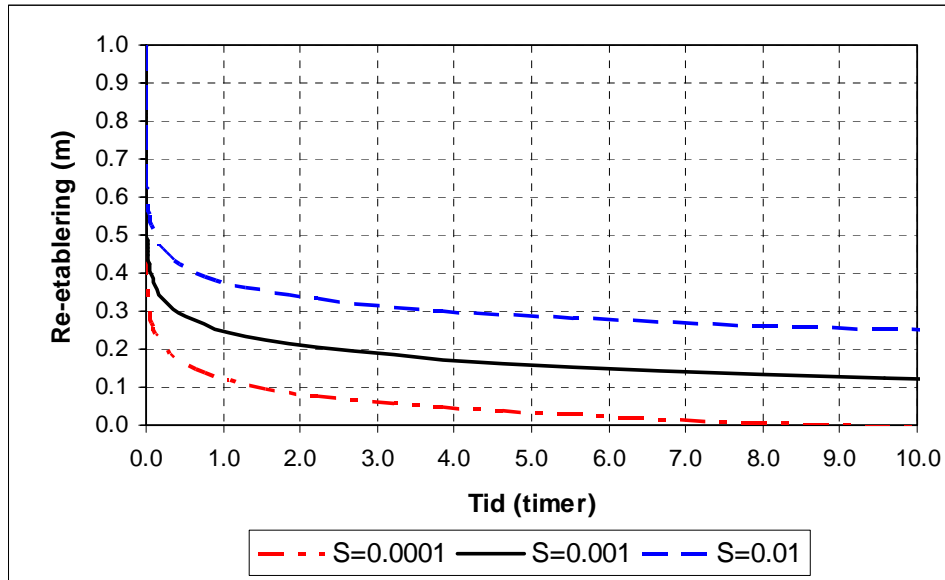
Figur 12.2 Pejlinger fra observationsboring placeret tæt på indvindingsboring med varierende indvindingsrate. I perioder, hvor der ikke pumpes, stiger trykniveauet med flere meter.

Enkeltpejlinger af trykniveauet foretages rutinemæssigt i forbindelse med udførelsen af vandforsyningsboringer, geotekniske boringer, undersøgelsesboringer m.v. Dvs. for en stor del af de boringer, der er registreret i Jupiter, eksisterer der mindst en grundvandspejling. Ofte foretages en ekstra pejlning i forbindelse med amtets lokalisering af boringen. Kvaliteten af målingerne afhænger i høj grad af, om boringen er nivelleret.

Da mange boringer i et givet område vil være af ældre dato, kan observationerne fra boringernes etablering sprede sig over en tidsmæssig lang periode, og det er derfor vigtigt at vurdere, om observationerne repræsenterer den situation, som modellen simulerer. Desuden vil det altid være vanskeligt at vurdere, hvor godt en enkeltmåling repræsenterer den sæsonmæssige tilstand (sommer, middel), som der simuleres.

Enkeltpejlinger af trykniveauet opnås typisk også ved gennemførelse af synkronpejlerunder, hvor tilgængelige boringer pejles indenfor et relativt kort tidsrum. I indvindingsboringer er det

praksis at stoppe pumpen i nogle timer, hvorefter pejling foretages. Det antages implicit ved denne fremgangsmåde, at det pejlede trykniveau repræsenterer rovandspejl. Hvor godt denne forudsætning er opfyldt afhænger af sænkning før pumpestop, transmissivitet T , og magasintal S , for det pågældende magasin. Figur 12.3 viser re-etableringen af trykniveauet i et 10 m tykt artesisk magasin med $T = 1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$, hvor der oppumpes $60 \text{ m}^3/\text{dag}$. Afsænkningen før pumpestop var på 1 m.



Figur 12.3 Sænkning som funktion af tiden efter pumpestop i et magasin, hvor sænkningen før pumpestop var på 1 m (beregnet vha. en Theis-løsning).

Det ses, at forløbet af re-etableringen er stærkt afhængig af magasintallet. Store magasintal resulterer i et system, der reagerer langsomt på ændringer i randbetingelser, mens små magasintal giver hurtige responstider. Figuren viser, at der i det viste eksempel let kan begås en signifikant fejl, hvis der pejles indenfor nogle få timer efter pumpestop. Der er derfor risiko for, at trykniveauet, der er fundet via pejlinger af denne type, vil være konsekvent for lavt i forhold til det "sande" trykniveau.

Hvis det antages, at indvindingsboringerne, hvor der er udført pejling under pumpestop, er indlagt i grundvandsmodellen, vil det introducere store fejl at anvende disse data i kalibreringen, da modellen i så fald vil simulere en sænkning svarende til den specificerede oppumpningsrate, men pejlingen tilnærmelsesvis repræsenterer et rovandspejl. Det må derfor anbefales ikke at anvende sådanne pejlinger til kalibrering af modellen.

I tabel 12.1 er pejlinger foretaget i forskellige boringer og under forskellige betingelser kategoriseret og deres egnethed som kalibreringsgrundlag er vurderet.

Tabel 12.1 Kategorisering af grundvandspejlinger.

Pejlingstype	Egnethed som kalibreringsgrundlag
Tidsserie fra observationsboring	Velegnet til både stationær og dynamisk model. Indflydelse fra evt. nærliggende indvindingsboring bør vurderes
Tidsserie fra pumpeboring	Uegnet som kalibreringsgrundlag i numerisk model, da sænkningstragten omkring boringen vanskeligt lader sig reproducere tæt på boringen
Enkeltpejling ved etablering	Egnet som kalibreringsgrundlag for stationær model. Svært at vurdere eventuelle fejl. Svært at kvantificere ikke-stationære effekter præcist
Synkronmåling	Måling foretaget i pumpeboring med midlertidig indvindingsstop svær at anvende som kalibreringsgrundlag. Måling foretaget i observationsboring egnet, dog med samme forbehold som anført ovenfor (fejl og ikke-stationaritet)

12.3.3 Datakontrol og processering

Der bør foretages en kontrol af data med henblik på at vurdere konsistens. Herefter vurderes det, om udvalgte data skal forkastes og sådanne fravalg begrundes og dokumenteres. Der laves en oversigt over data, som har passeret denne indledende kvalitetssikring af processerede inddata. Disse data kan betegnes 'kvalificerede data'.

Kvaliteten og kvantiteten af kvalificerede data, der er egnede til modelkalibrering og validering skal vurderes. Det er specielt vigtigt, at der foreligger en rimelig rumlig fordeling af data. Hvis det vurderes, at der ikke er data nok, så bør behov for yderligere data beskrives og kommunikeres. For dynamisk modellering er det vigtigt, at der foreligger tilstrækkeligt lange tidsserier til både kalibrering og validering, typisk som minimum ca. 10 års data, og at disse data dækker samme periode.

Kontrollen af observationsdata vil i første omgang bestå i en analyse af 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 indvindingsboringer som er nedlagt, m.m.

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. Hvilke typer data der skal inddrages, og hvilken slags midling der skal udføres, afhænger af formålet med modelleringsarbejdet.

Vandføringsdata for grundvandszonen er ikke direkte tilgængelig, men der kan opnås et indirekte mål for grundvandet 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 grundvands-systemer forsøges at tolke 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 negligible 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 (Sonnenborg et al., 2003).

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. Desuden vil informationsmængden pr. observation typisk være mindre i områder med høj koncentration af data.

Jo flere typer data, der anvendes, des større chance er der for at undgå problemer med manglende identificerbarhed og entydighed (non-uniqueness). Desuden kan inddragelsen af flere datatyper resultere i en reduktion af usikkerheden på de estimerede parametre (Hill, 1998).

12.4 USIKKERHED PÅ OBSERVATIONSDATA

Kvaliteten (usikkerheden) af kalibreringsdata skal 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 objektivi 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 (se kapitel 19). 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.

12.4.1 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 centimeter.

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 celled 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 indirekte give anledning til afvigelser mellem observeret og simuleret trykniveau, da topografisk variation bl.a. kan påvirke fordelingen af nettonedbør og grundvandsdannelse indenfor en numerisk celle. 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 celledimensioner på 1×1 km, blev der beregnet en standardafvigelse på 4.9 m på cellernes middellinje. 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, se kapitel 11. Det kræver derfor 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, se kapitel 11. 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, 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 trykniveauerne 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 og DK-model Fyn, i begge tilfælde for beregningslag 3 som er

domineret af sandformationer, samt for DK-model Sønderjylland og DK-model Sjælland. 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 standardafvigelse) summeres, og den samlede standardafvigelse på observationsdata kan beregnes som kvadratroden af denne sum (vist i kolonnen længst til højre i tabel 12.2).

Tabel 12.2 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 $\Delta x J$	$C^{1/2} \lambda s_{lnK} J^{1)}$	$\Delta h_t/2$ ²⁾	0 – 1	$\sqrt{\sum s^2}$
Esbjerg ⁴⁾	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
Sønderjylland ⁵⁾	0.5 - 1		1 - 2		<=		3.0
Sjælland ⁶⁾	0.1	1.5	1.5	2.1	0.5	0.5	3.1

- 1) s_{lnK} er standardafvigelsen på log K. λ er korrelationslængden for log K. C er en konstant hvis værdi afhænger af strømningssystemet, se tabel 11.7. Se i øvrigt kapitel 11 for yderligere forklaring.
- 2) Δh_t angiver amplituden på sæsonvariationerne i hydraulisk trykniveau.
- 3) Inkludere effekter som vertikal skalafejl, variationer i topografi og usikkerhed på grundvandsdannelsen..
- 4) Kilde: Harrar et al. (2003)
- 5) Kilde: Sonnenborg et al. (2003)
- 6) Kilde. Henriksen et al. (2003)

Usikkerheden beregnet i kolonnen længst til højre i tabel 12.2 repræsenterer den nedre grænse for, hvor præcist en model med horisontal diskretisering Δx kan forventes at reproducere de tilgængelige trykniveauobservationer. Eventuelle fejl i f.eks. den konceptuelle model, modelopsætningen, og parameterværdier vil forringe præcisionen af modelresultaterne udover dette niveau.

Boks 12.1 *Eksempel Lollandsmodel (Storstrøms Amt, 2003a).*

Det er vurderet at usikkerheden på pejlinger foretaget i nivellerede borer er omkring 1,25 m og ro-pejlinger foretaget i ikke nivellerede pejleboringer er omkring 2 meter. Disse værdier skønnes at være gældende på Lolland – hvor den gennemsnitlige fejl på observationsdata skønnes til 1,5 meter. Ideelt set er det mest fordelagtigt, hvis pejlesteder anvendt i kalibreringen har ens kvalitet og fordeler sig jævnt ud over området. En gennemgang af pejleboringer afslører, at kvaliteten med henblik på kalibrering ikke er ensartet – forskellige længder af tidsserier og påvirkning af indvinding præger pejlingerne. Der er endog tale om få perioder, hvor der foreligger en relativ stor mængde pejlinger i forskellige borer – der er bedst dækning efter år 2000, hvor Amtet etablerede 10 pejleboringer med logger. Før den tid er pejlegrundlaget primært enkeltstående pejlerunder foretaget på mindre områder – eller tidsserier fra pejlinger foretaget af vandværkerne i deres borer.

12.4.2 *Observationer af vandløbsvandføring*

Tidsserier af afstrømningsdata er behæftet med usikkerhed 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/skæring 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 middelminimum, q , og standardafvigelsen på årsminimum, s_q ,

$$s_q = 0.495 + 0.088q \quad (12.1)$$

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

$$s_{\bar{q}} = \frac{s_q}{\sqrt{n}} = \frac{0.495 + 0.088q}{\sqrt{n}} \quad (12.2)$$

hvor n er antallet af årsminima, hvorpå analysen bygges. Hvis anbefalingerne fra Jensen (1993) følges, er $n = 20$. Ved anvendelse af ovenstående ligning (12.2) 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. 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, overfladeruhed, 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.

I boks 12.2 ses et eksempel på overvejelser omkring usikkerheden på målinger af vandløbsafstrømning for en model for Lolland.

Boks 12.2 Eksempel Lollandsmodel (Storstrøms Amt, 2003a).

Målinger af vandføringsdata er behæftet med usikkerhed hidrørende fra forskellige kilder. Usikkerheden på vandløbsafstrømningen er typisk relativ lille på målinger af strømningshastighed i veldefinerede tværsnit. Vandføringsdata, som er bestemt ved brug af Q-H relation, vil typisk have en væsentlig større usikkerhed. Usikkerheden vil afhænge af de data som Q-H relationen er opbygget af. Da der oftest vil være flere målinger i normalområdet, vil ekstreme hændelser være behæftet med en større usikkerhed. Forskellige undersøgelser påpeger, at der ikke kan påvises nogen sæsonvariation i usikkerheden på vandløbsafstrømninger. Relativt observeres dog den største fejl på vandføringen i grødesæsonen. Betydelige afvigelser observeres ligeledes uden for sommermånederne, sammenfaldende med stor afstrømning. Den absolutte usikkerhed ses at være klart størst ved store afstrømninger. Der er ligeledes en tydelig sammenhæng mellem måleintensitet og usikkerhed, idet en større måleintensitet medfører en sikrere bestemmelse af afstrømningen. En kvantificering af usikkerheden er vanskeligere end på grundvandspejlingerne. Ved benyttelse af vandføringsdata i en numerisk model vil skalaeffekter have en indflydelse på vandføringsdata. Detaljeringsgraden samt den geometriske repræsentation vil afhænge af den valgte diskretisering.

12.4.3 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 til vandløb). Det kræver imidlertid, at procesbeskrivelser, den numeriske formulering, randbetingelser, m.m. er fejlfrie. Desuden kræver det, at de hydrauliske parametre kendes i hver 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 ligningsystem, diskretiseringsfejl, de anvendte randbetingelser, de anvendte hydrauliske parametre, etc. 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): $h_{obs} \pm a \cdot s_{obs}$, 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.

Desuden kan estimaterne af usikkerheden på observationerne anvendes til vægtning af forskellige residualer af forskellige type, hvilket specielt er anvendeligt i forbindelse med invers modellering, se kapitel 14.

12.5 PERFORMANCE KRITERIER

12.5.1 Typer af kriterier

Nærværende afsnit er baseret på en let revision af udsnit fra kapitel 10 i den gamle STÅBI, jf. Sonnenborg (2001).

Kvantitative performancekriterier 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

$$ME = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}) \quad (12.3)$$

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

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |(\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i})| \quad (12.4)$$

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

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i})^2} \quad (12.5)$$

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

$$SE = \sqrt{\frac{1}{n-P} \sum_{i=1}^n w_i (\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i})^2} \quad (12.6)$$

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

$$SE = \sqrt{\frac{1}{n-P} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}}{s_{obs,i}} \right)^2} \quad (12.7)$$

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 borer og m er antallet af observationer i tidsserien, vil den samlede fejl kunne kvantificeres som

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (\psi_{obs,i}^j - \psi_{sim,i}^j)^2 \quad (12.8)$$

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:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\bar{\psi}_{obs,i} - \bar{\psi}_{sim,i})^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [(\psi_{obs,i}^j - \bar{\psi}_{obs,i}) - (\psi_{sim,i}^j - \bar{\psi}_{sim,i})]^2 \quad (12.9)$$

hvor $\bar{\psi}$ angiver den tidsmidlede variabel. Den første sum kvantificerer forskellen mellem tidsmidlet observeret og simuleret trykniveau for de anvendte borer, og svarer dermed til *RMS*, lign. (12.5). 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 tidlige fejl derfor kvantificeres vha. følgende udtryk:

$$RMST = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [(\psi_{obs}^j - \bar{\psi}_{obs}) - (\psi_{sim}^j - \bar{\psi}_{sim})]^2} \quad (12.10)$$

De sidste normer, der gengives her, er R^2 , $Fbal$ og FL altså indikatorer der siger noget om afvigelse i forhold til daglig vandføring, middelfafstrømning og minimumsvandføring (R^2 benævnes også "model efficiency" eller "explained variance" – Nash and Sutcliffe (1970). Bemærk: I MIKE SHE terminologi svarer R^2 til størrelsen E og ikke til korrelationskoefficienten R^2 der produceres i statistikken):

$$R^2 = \frac{\sum (\psi_{obs} - \bar{\psi}_{obs})^2 - \sum (\psi_{obs} - \psi_{sim})^2}{\sum (\psi_{obs} - \bar{\psi}_{obs})^2} \quad (12.11)$$

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 tidsserier af observeret og simuleret tilstandsvariabel, typisk vandløbsafstrømning.

Et mål for evnen til at simulere den gennemsnitlige afstrømning for en bestemt vandføringsstation kan vurderes ud fra $Fbal$ (i %), Henriksen et al. (2003):

$$Fbal = 100 \frac{\bar{Q}_o - \bar{Q}_s}{\bar{Q}_o} \quad (12.12)$$

Et mål for evnen til at simulere minimumsafstrømning kan evt. vurderes ud fra FL (Wood, 1974; Henriksen et al., 2003):

$$FL = \sum_i \left[\frac{(Q_{o,i} - Q_{s,i}) \bar{Q}_o}{Q_{o,i}^2} \right]^2 \quad (12.13)$$

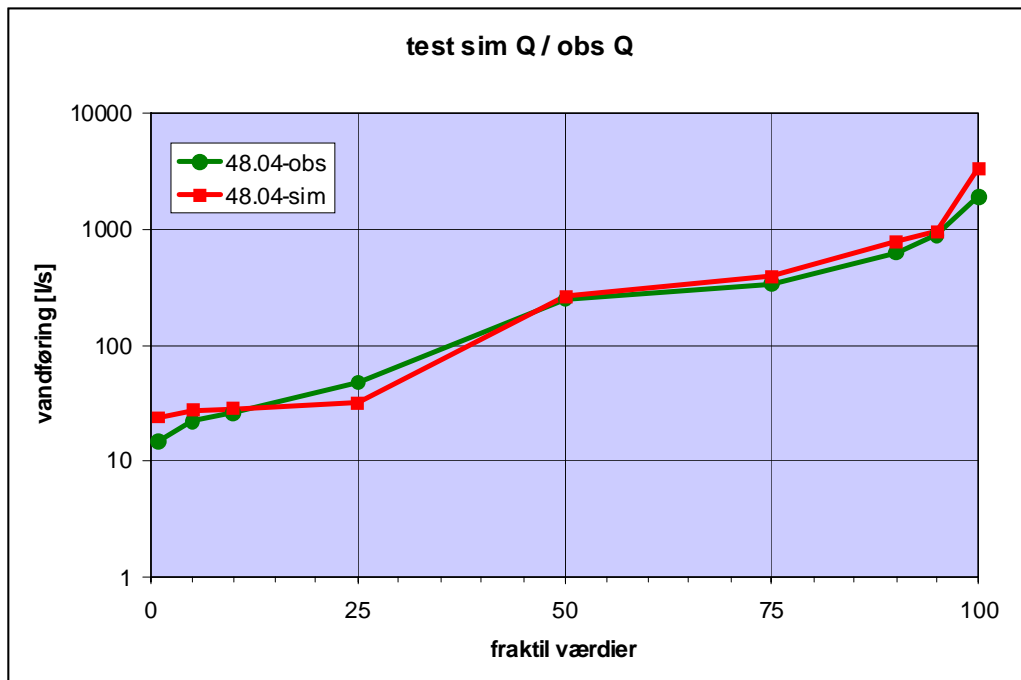
hvor $Q_{s,i}$ er simuleret daglig vandføring for dag i (l/s), $Q_{o,i}$ er observeret daglig vandføring for dag i (l/s), \bar{Q}_o er gennemsnitlig observeret afstrømning i test-perioden (l/s), og \bar{Q}_s er gennemsnitlig simuleret afstrømning i test-perioden (l/s).

Minimumsafstrømnings-indikatoren FL er meget følsom overfor observeret afstrømning tæt på nul og forudsætter omhyggelig udvælgelse af vandføringsstationer til kalibrering og validering. For at minimere støj bliver FL normaliseret i forhold til en valgt referencekørsel:

$$FL_{norm} = \frac{FL}{FL_{ref}} \quad (12.14)$$

Det understreges, at der ikke findes et godt mål til vurdering af afvigelser i forhold til minimumsafstrømningen. FL giver en statistisk størrelse, som vægter de små afstrømninger mest, men på den anden side er størrelsen pr. definition ustabil ved de meget små vandføringer.

Som alternativ til at sikre en god beskrivelse af afstrømningshydrografen, som ovenstående flow-indikatorer alle tilstræber, kan det i mange tilfælde være mere optimalt at kigge på udvalgte fraktilværdier baseret på en rangordning af de daglige vandføringer og beregning af f.eks. 5, 10, 25, 50, 75, 90 og 95 % fraktil værdier, se figur 12.4.



Figur 12.4 Sammenligning af fraktilværdier for station 48.04 Højbro å. Baseret på National vandressource model for Sjælland og daglig vandføring 1991-1996. Et robust performancekrav kunne være residualer på udvalgte fraktilværdier, f.eks. 5% fraktilen - Q95 i habitat-terminologi eller 10 % fraktilen - Q90). I så fald kunne man specificere et nøjagtighedskrav, hvor modellen max måtte afvige med en vis procentdel i forhold til udvalgte fraktiler.

12.5.2 Valg af nøjagtighedskriterier

Det er hensigtsmæssigt at opstille kriterier for, hvor præcist modellen skal kunne reproducere kalibreringsdata, før kalibreringsprocessen 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 strømningsmønstret 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 relateres til usikkerheden på observationsdata. Standardafvigelsen på det hydrauliske trykniveau 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. (12.7) 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. (12.10), benyttes, og det vil være rimeligt at relatere den beregnede *RMST*-værdi til amplituden på de sæsonmæssige variationer i observeret trykniveau.

I tabel 12.3 er der angivet alternative kriterier for overensstemmelsen mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau.

Tabel 12.3 Kriterier for overensstemmelsen mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau og vandløbsafstrømning. 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 trykniveauafskel 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.
6	$R^2 \geq \beta_5$	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.
7	$ F_{bal} \leq \beta_6$	Et mål for evnen til at simulere den gennemsnitlige afstrømning for en bestemt vandføringsstation
8	FL	Minimumsafstrømnings indikatoren FL er meget følsom overfor observeret afstrømning tæt på nul og forudsætter omhyggelig udvælgelse af vandføringsstationer til kalibrering og validering.

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. (2) Residualerne skal være fordelt rimeligt jævnt både i tid og sted. Selv om kriterium nr. 1 i tabel 12.1 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 reproduceres 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.

12.6 TESTKØRSEL OG FASTLÆGGELSE AF KVANTITATIVE OG KVALITATIVE NØJAGTIGHEDSKRITERIER FORUD FOR KALIBRERING

Afhængigt af om usikkerheden på trykniveauobservationsdata er bestemt, kan både kriterium nr. 1 samt et eller flere af kriterierne 2 – 5 i tabel 12.3 specificeres. Hvor stringente krav, der skal opstilles til en given model, afhænger af formålet med undersøgelsen. I tabel 12.4 er der givet et eksempel på, hvordan nøjagtighedskriterierne bliver skærpet i takt med at kravene til modellens pålidelighed øges.

Tabel 12.4 Nøjagtighedskriterier for forskellige modeltyper. Procentsatsen i parentes angivet for kriterium 2 svarer til konfidensintervallet for det pågældende nøjagtighedskriterium.

	Overslagsberegning	Akvifer simulering	
		Konservativ	High fidelity
β_1	0.05	0.025	0.01
β_2	2.6 (99%)	2 (95%)	1.65 (90%)
β_3	0.15	0.1	0.05
β_5	0.4	0.6	0.75
β_6	0.3	0.2	0.1

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

Det er vigtigt at pointere, at en models performance ikke kan karakteriseres alene ud fra et enkelt af kriterierne opskrevet i tabel 12.4. For at kategorisere en model som f.eks. "hi-fi" skal både de højeste krav til ME, RMS og evt. andre størrelser være opfyldt samtidigt med at de opstillede kvalitative krav overholdes.

Tabel 12.5 Eksempel på opstillede performance kriterier for DK model Sjælland (Henriksen et al., 2003). I stedet for et enkelt krav til f.eks. RMS, så kan det være hensigtsmæssigt at arbejde med en karakterisering efter forskellige klasser f.eks. fremragende, meget god, god, ringe og meget ringe, og så sigte efter at opnå så mange stjerner som muligt.

Performance indikator	Fremragende (5 points)	Meget god (4 points)	God (3 points)	Ringe (2 points)	Meget ringe (1 point)
RMS (m)	< 4	4-6	6-8	8-10	> 10
R^2	> 0.85	0.65-0.85	0.50-0.65	0.20-0.50	< 0.20
F_{bal}	< 5%	5-10%	10-20%	20-40%	> 40%
Aggregeret score	☆☆☆☆☆	☆☆☆☆	☆☆☆	☆☆	☆

I tabel 12.5 ses et eksempel på kategorisering af overensstemmelsen mellem observeret og simuleret variabel. Intervallet fra <4 (fremragende) til >10 (meget ringe) på RMS er subjektivt fastlagt dog med en skalering på baggrund af skøn af usikkerheder på pejleobservationer i forhold til modelskala. Denne var her opgjort til 3,1 m (Henriksen et al., 2003) for DK-model Sjælland, men afspejler dels en modelskala på 1x1 km og dels at der er anvendt ret usikre observationsdata fra JUPITER.

Ved modellering på mindre skala og ud fra bedre datagrundlag f.eks. baseret på pejletidsserier eller nivellerede observationsboringer skal anvendes en mere restriktiv skala. Ofte vil man med modeller med maskevidder på 200-500 meter og god datakvalitet på observationer, kunne nå under 2,0 meter i RMS værdi. I andre tilfælde betyder heterogeniteter og andre forhold, at man må acceptere mindre restriktive performancekrav.

Erfaringer med R^2 værdier for afstrømning anbefaler værdier mellem 0.50 og 0.95 (Henriksen et al., 2003). Værdierne for F_{bal} er baseret på oplande af størrelsesordenen 100-1000 km². For små oplande kan det være nødvendigt at operere med mindre restriktive performancekrav.

Boks 12.4 Eksempel på indledende nøjagtighedskriterier og endelige nøjagtighedskriterier for Lollandsmodel - Storstrøms Amt, (2003a).

I udbudsbetingelser for opstilling af en regional strømningsmodel for Lolland, som havde til formål at bidrage med viden om behov for særlig indsats angående geologisk detailkortlægning, definition af randbetingelser for numeriske lokalmodeller for fem indsatsområder og belysning af grundvandsressourcens størrelse, blev nøjagtighedskrav specificeret som følger:

Der forudsættes opstillet en 3D numerisk strømningsmodel med henblik på akvifersimulering, det vil sige med et højt krav til modellens beskrivelse af strømningsforhold i tre dimensioner, samt tidslige variationer, og udveksling mellem grundvand og vandløb...Tilbud skal indeholde en nærmere beskrivelse af princip for fastlæggelse af beregningslag. Den regionale model diskretiseres horisontalt i 500 x 500 meter kasser...I forbindelse med partikelbanesimuleringer skal indvindingsoplande til oppumpninger > 25.000 m³/år beskrives...Ud fra en første kørsel med den stationære model og ikke stationære model og bestemte kvantitative kalibreringsmål (fx ME, RMS, SE eller R², se Henriksen et al., 2001), skal der være udarbejdet nøjagtighedskrav til slutmodellen efter endt kalibrering.

Modelløren foreslog på dette grundlag såvel et sæt kvantitative og et sæt kvalitative kriterier for kalibreringen. Der blev foreslået krav til trykniveau formuleret som middelfejl (ME) < 0,75 m, root mean square afvigelse (RMS) < 1,5 m og standardafvigelse (STDres/delta H) < 0,3 m. For vandløb anvendtes krav til vandbalancefejlen Fbal (%). Sidstnævnte blev formuleret som afhængig af middelvandføringens størrelse. For vandføring > 500 l/s var kravet: Fbal < 10%, 200-500 l/s: Fbal < 15 %, 100-200 l/s: Fbal < 25 %, 50 – 100 l/s: Fbal < 50 % og for vandføringer under 50 l/s: Fbal < 100 %. De tilsvarende krav for E (R²) var fastsat til: For vandføring > 500 l/s var kravet: > 0,75; 200-500 l/s: > 0,65; 100-200 l/s: > 0,5; 50 – 100 l/s: > 0,2 og for vandføringer under 50 l/s: > 0,0.

Tabel 12.6 Eksempel på startgæt og variationsrammer for DK model Sjælland (Henriksen et al., 2003).

Parametre i mættet zone (SZ)	Startgæt (Range)	
Tidskonstant, dræn	$2 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1} (1 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-8})$	
Hydraulisk ledningsevne	Horisontal	Vertikal
Lag 1 (sprækket moræneler)	$1 \times 10^{-5} \text{ m/s} (1 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-4})$	$1 \times 10^{-7} \text{ m/s} (1 \times 10^{-8} - 1 \times 10^{-6})$
Lag 2, 4, 6, 8 and 10 (moræneler og ler)	$1 \times 10^{-7} \text{ m/s} (1 \times 10^{-10} - 1 \times 10^{-6})$	$1 \times 10^{-9} \text{ m/s} (1 \times 10^{-11} - 1 \times 10^{-7})$
Lag 3, 5, 7 and 9 smeltevandssand og grus)	$1 \times 10^{-4} \text{ m/s} (1 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-2})$	$1 \times 10^{-5} \text{ m/s} (1 \times 10^{-7} - 1 \times 10^{-3})$
Lag 11 (kalk og limsten)	distribueret ($1 \times 10^{-7} - 1 \times 10^{-3}$)	distribueret (x 0.1) ($1 \times 10^{-8} - 1 \times 10^{-4}$)
Impermeabel bund	$1 \times 10^{-20} \text{ m/s}$	$1 \times 10^{-20} \text{ m/s}$
Sandlinser i ler	$1 \times 10^{-4} \text{ m/s} (1 \times 10^{-7} - 1 \times 10^{-3})$	$1 \times 10^{-5} \text{ m/s} (1 \times 10^{-8} - 1 \times 10^{-4})$
Glacialtektoniske linser i ler	$2 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	$1 \times 10^{-7} \text{ m/s}$
Glacialtektoniske linser i sand	$1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$	$1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$
Magasintal	Frit magasintal	Artesisk magasinkoefficient
Lag 1 (sprækket moræneler)	0.25 m/m (0.05–0.20)	$0.0001 \text{ m}^{-1} (1 \times 10^{-4} - 1 \times 10^{-2})$
Lag 2, 4, 6, 8 and 10 (moræneler and ler)	0.25 m/m (0.01–0.18)	$0.0001 \text{ m}^{-1} (1 \times 10^{-4} - 1 \times 10^{-2})$
Lag 3, 5, 7 and 9 smeltevandssand og grus)	0.25 m/m (0.10–0.35)	$0.0001 \text{ m}^{-1} (1 \times 10^{-5} - 1 \times 10^{-3})$
Lag 11 (kalk)	0.25 m/m (0.01–0.35)	$0.0001 \text{ m}^{-1} (1 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-3})$
Udveksling mellem grundvand og vandløb		
Lækagekoefficient, vandløbsbund	$1 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1} (1 \times 10^{-10} - 1 \times 10^{-6})$	
Interaktionstype	type 3 (kun vertikalt tryktab)	
Overlandflow (OC)		
Overfladeruhed, Manning (M)	$3 \text{ m}^{-1/3}/\text{s} (1-5)$	
Overflademagasinerings	0.01 m (0–0.05)	
Vandløbsruhed, Manning (M)	$20 \text{ m}^{-1/3}/\text{s} (10-35)$	

Boks 12.4 Eksempel Stevns model (Storstrøms Amt, 2003b).

Som kvantitative performancekrav blev efter stationær og dynamisk testkørsel med MIKE SHE model med DAISY input fastlagt krav til RMS ($< 1,75$ m), R^2 (udvalgte stationer $> 0,65$ og kun $\frac{1}{4}$ af stationerne måtte være $< 0,6$) og F_{bal} .

Kravet til RMS blev fastlagt ud fra at der i formålet var specificeret akvifer simulering, og at 5 % af den største forskel mellem potentialeverdierne inden for modelområdet (forskul egentlig = 75 m, men kun to observationer lå i dette interval, derfor blev det mere restriktive interval hvor de fleste observationer var beliggende vurderet til = 35 m; 5 % af 35 meter = 1,75 m som krav til RMS). Testkørslen viste for den stationære model en RMS værdi på 4,85 m, en middelfejl ME på -2,63 m og en MAE på 3,62 m.

Testkørslen viste relativt dårlige R^2 værdier med en middelværdi på 0,05 for kalibreringsperioden. Dette problem viste sig dog til dels at skyldes problemer med DAISY inputtet som manglede noget dynamik.

Kravet til F_{bal} blev fastsat så der for stationer med stor afstrømning (> 15 mio. m^3 pr. år) blev sat et krav på 10 %, for intervallet 5 – 15 mio. m^3 pr. år var kravet 15 %, og under 5 mio. m^3 pr. år 25 %. Den samlede vandbalance for modelområdet (Qsim total / Qobs total) var fastsat til 5 %. Testkørslen viste for den stationære model at to ud af 8 stationer umiddelbart overholdt kriteriet med afvigelse på 6-13 %. Flere stationer havde afvigelse på indtil 50 %.

De kvalitative krav var fastsat som følgende:

- De estimerede parametre skal have realistiske værdier
- Residualerne skal være fordelt fornuftigt arealmæssigt. F.eks. kan de kvantitative kriterier godt være opfyldt for hele modellen under ét, mens modellen konsekvent simulerer for store eller små værdier
- Områdets hydrogeologiske karakteristika skal reproducere af modellen. F.eks. skal modellen være i stand til korrekt at simulere strømningsretning, retningen af gradienten over dybden eller beliggenheden af grundvandskel
- For vandløbene skal den rigtige dynamik afspejles. Dvs. en hændelse giver den rigtige respons både i tid og sted.
- Vandløbsmodellen giver de korrekte ekstremværdier (min og max). Dvs. at dynamikken er korrekt også i yderområdet af spektret.

12.7 REFERENCER

Beven, K. (2002) Towards a coherent philosophy for modelling the environment. Proc Roy Soc Lond A 2002; 458(2026): 2465-84.

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.

Feldman, S.P. (2004) The culture of objectivity: Quantification, uncertainty, and the evaluation of risk at NASA. Human Relations. Vol. 57(6): 691-718. The Tavistock Institute. SAGE Publications. London.

Freyberg, D. (1998) An exercise in ground-water model calibration and prediction. Ground Water, v. 26, no. 3, p. 350-360.

Gelhar (1986) Stochastic subsurface hydrology. Englewood Cliffs. New Jersey. Prentice Hall.

Harrar, W.G., Sonnenborg, T.O., and Henriksen, H.J. (2003) Capture zone, travel time, and solute-transport prediction using inverse modeling and different geological models. Hydrogeology Journal 11: 536-548.

Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Sonnenborg, T.O., Gravesen, P., Brun, A., Refsgaard, A. and Jensen, K.H. (2001) STÅBI i grundvandsmodellering. Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse Rapport 2001/56.

Henriksen, H.J., Troldborg, L., Nyegaard, P., Sonnenborg, T.O., Refsgaard, J.C. and Madsen, B. (2003) Methodology for construction, calibration and validation of a national hydrological model for Denmark. *Journal of Hydrology* (280) 52-71.

Hill, M.C. (1998) Methods and guidelines for effective model calibration. U.S. Geological Survey. Water-Resources investigation report 98-4005. Denver, Colorado. 1998.

Jensen, J.L. (1993) Rererenceperiode for karakteristiske afstrømningsværdier. Publikation nr. 13 fra Fagdatacenter for Hydrometriske Data, Hedeselskabet.

Middlemis, H. (2004) Benchmarking best practice for groundwater flow modelling. The Winston Churchill Memorial Trust of Australia. 13. December 2004.

Nash, J.E. and Sutcliffe, J.V. (1970) Riverflow forecasting through conceptual models. Part 1: a discussion on principles. *Journal of Hydrology* 10, 282-290.

Refsgaard, J.C. and Henriksen, H.J. (2004) Modelling guidelines – terminology and guiding principles. *Advances in water resources*. (27) 71-82.

Refsgaard, J.C., Henriksen, H.J., Harrar, W.G., Scholten, H. and Kassahun, A. (2004) Quality assurance in model based water management –review of existing practice and outline of new approaches. *Environmental Modelling & Software* (in press).

Scholten, H., Van der Tol, M.W.M. (1998) Quantitative validation of deterministic models; when is a model acceptable? In: Obaidat, M.S., Davoli, F., DeMarinis, D. (Eds.), *The proceedings of the summer computer simulation conference*. SCS, The society for computer simulation international, San Diego, CA, USA, pp. 404-409.

Sonnenborg, T.O. (2001) Kalibrering af strømningsmodel. Kapitel 10 i Henriksen et al. (2001).

Sonnenborg, T.O., et al. (2003)

Storstrøms Amt (2003a) Regional strømningsmodel for Lolland – Hydrogeologisk model. DHI, Institut for vand og miljø.

Storstrøms Amt (2003b) Indsatområderne Stevns og Fakse, Fase 2: Detailkortlægning, Milepæl 2: Modelopstilling og fastlæggelse af nøjagtighedskrav, Rambøll, August 2003.

The council for regulatory environmental modellering (2003) Draft guidance on the development, evaluation, and application of regulatory environmental models. Principal authors: Pasky Pascual, Neil Stiber and Elsie Sunderland. Office of science policy. Office of research and development. Washington D.C.

USGS (2004) Guidelines for evaluating ground-water flow models. Scientific Investigation Report 2004-5038. U.S. Department of the Interior. U.S. Geological Survey. By Thomas E. Reilly and Arlen W. Harbaugh. Reston, Virginia.

Kapitel 13 KALIBRERING AF STRØMNINGSMODEL

Torben Obel Sonnenborg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Kalibreringsprotokol, identificerbarhed, entydighed, parameterestimation, sensitivitsanalyse, parameterusikkerhed

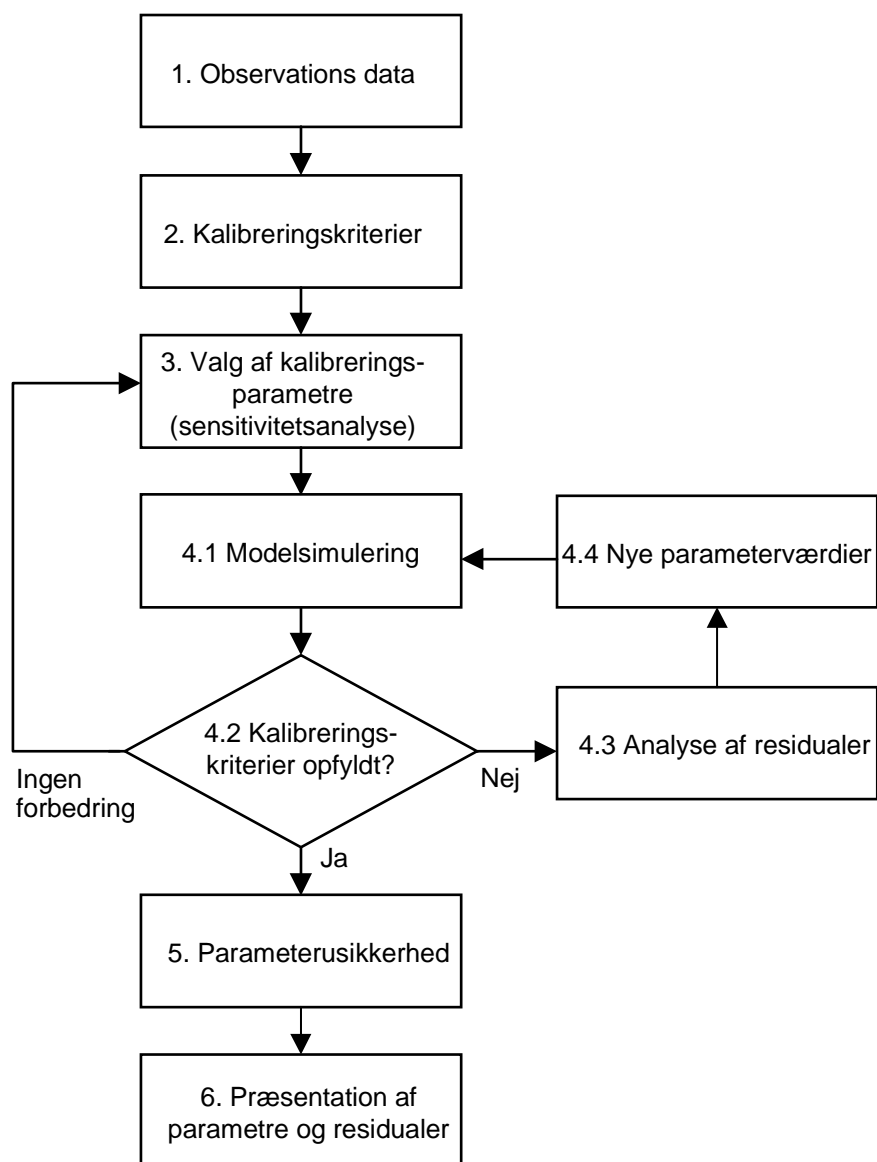
ABSTRACT: Kalibrering er en af de mest tidskrævende faser i modeludviklingen. Samtidig er det et af de mest kritiske trin i udviklingen af en pålidelig model. Det er derfor af afgørende betydning, at kalibreringsprocessen struktureres hensigtsmæssigt, hvis en optimal model skal opnås. I dette kapitel 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.

13.1 INDLEDNING

Anvendelsen af en numerisk model forudsætter, at parametrene, som indgår i de diskretiserede ligninger, f.eks. strømning ligningen (5.9), kvantificeres. I tilfældet med tredimensional ikke-stationær grundvandsstrømning, lign. (5.9), 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 7) 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 skalæffekter 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 strømningssmodellen 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 15) vurderes det, om modellen også er i stand til at forudsige det fysiske systems opførsel i valideringsperioden.



Figur 13.1 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 13.1 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. De første to skridt i kalibreringsarbejdet er beskrevet i kapitel 12, og vil ikke blive omtalt yderligere her. 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 13.1). 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, ved gennemførelse af

en detaljeret sensitivitetanalyse eller ved anvendelse af invers modellering (se kapitel 14). 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.

13.2 KALIBRERINGSPARAMETRE

13.2.1 *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 egenskaber rumlige struktur antages kendt (f.eks. homogen fordeling, lineær funktion af stedet eller geostatistisk model). Parametriseringen er nødvendig for at kunne bestemme parameterværdierne, 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 parameterværdier 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 kapitel 11 eller 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 initiale parameterværdier 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 indbydes størrelsesfordeling mellem geologiske enheders parameterværdier. F.eks. vil den hydrauliske ledningsevne for moræneler forventes at være lavere end for smeltevandssand.

Parametermålinger vil også kunne fungere som initiale estimater i estimationsprocessen. For at opnå et tilfredsstillende kalibreringsresultat med en minimeret arbejdsindsats, er det vigtigt at have

præcise initielle parameterestimer. Passende brug af parametermålinger vil her være en vigtig informationskilde.

13.2.2 Valg af kalibreringsparametre

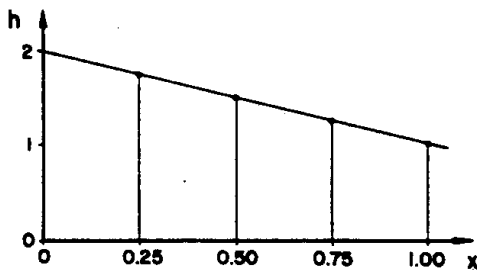
Følgende forhold skal tages i betragtning, når kalibreringsparametrene udvælges: (1) De skal være identificerbare, (2) de skal være relativt dårligt kendt, (3) de simulerede tilstandsvariable skal være tilstrækkeligt sensitive overfor ændringer i parameteren, (4) antallet af parametre skal minimeres.

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.

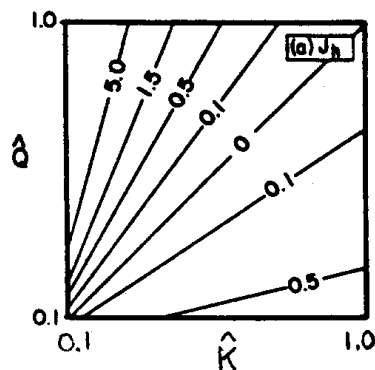
Et meget simpelt tilfælde på ikke identificerbarhed optræder i forbindelse med en stationær løsning. Magasinkoefficienten vil her være ikke identificerbar, da parameteren ikke indgår i det opstillede ligningssystem. De mere komplekse tilfælde af ikke identificerbarhed optræder, hvor forskellige parameterkombinationer kan resultere i samme trykfordeling. I figur 13.2 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 (12.5)) ses på figur 13.2b. Uendeligt mange kombinationer af K og Q kan resultere i samme trykniveauafdeling og dermed minimumsværdi af objektiv funktionen, og parametrene er derfor ikke identificerbare simultant.

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 efficient at inddrage andre parametre i estimationsprocessen.



Figur 13.2a Plot af trykniveau mod x i et endimensionalt eksempel (fra Carrera & Neuman, 1986).



Figur 13.2b Konturlinier af objektiv funktionen (svarende til en norm af typen (5.5)). Fra Carrera & Neuman (1986).

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 simpel sensitivitsanalyse 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 initielle værdi, og den resulterende påvirkning af de simulerede tilstandsvariable registreres (ofte udtrykt ved RMS-værdien). På baggrund af sensitivitsanalysen 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.

13.3 ESTIMATIONSTEKNIK

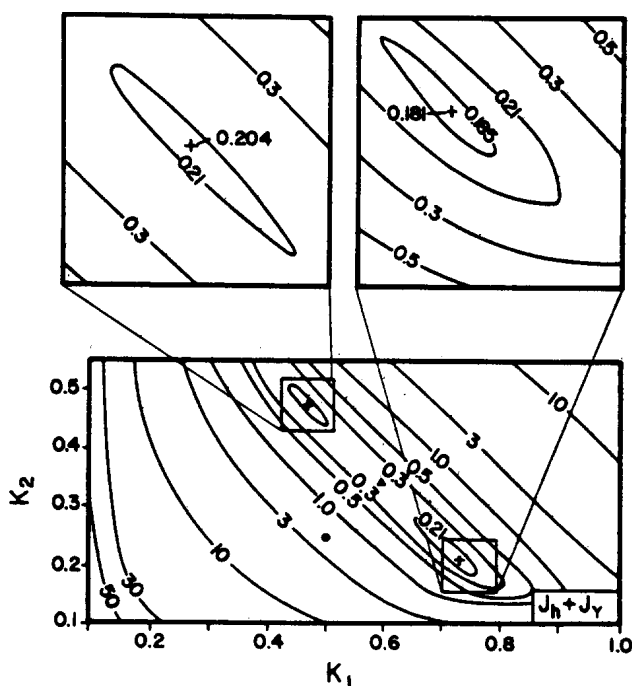
Estimationen af kalibreringsparametrene kan foretages enten ved manuel kalibrering eller automatisk kalibrering (invers modellering). Manuel kalibrering baserer sig på modellørens evne til successivt at ændre parameterværdierne, så modellen giver en forbedret beskrivelse af observationsdata. Den automatiske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

13.3.1 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. 12.5), kan være årsag til ikke entydighed, se figur 13.3, ligesom manglende identificerbarhed (se afsnit 13.2.2) kan være det. Hvis antallet af parametre overstiger antallet af observationer, vil problemet ligeledes være ikke-entydigt.

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).



Figur 13.3 Konturlinier for objektiv funktionen (en norm af typen (12.5)) for et én-dimensionalt strømningssystem med to hydrauliske ledningsevner, K_1 og K_2 (fra Carrera & Neuman, 1986).

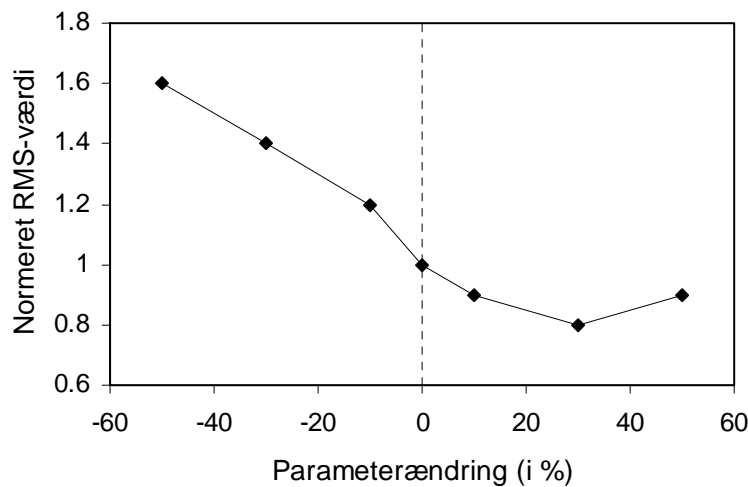
13.3.2 Manuel kalibrering ('trial-and-error' estimation)

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 simuleringens resultater 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 parameterværdi. Efterfølgende er det muligt at plote de beregnede RMS-værdier mod de testede parameterværdier og herved opnå et kriterium for, i hvilken retning og hvor meget parameterværdien skal ændres, for at opnå en bedre simulering af observationerne. I eksemplet illustreret i figur 13.4 ses, at der opnås en bedre beskrivelse af observationsdata, hvis den aktuelle kalibreringsparameter forøges med ca. 30%.

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.



Figur 13.4 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.

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.

13.3.3 Automatisk kalibrering (invers modellering)

I invers modellering sker estimationsprocessen 4.1 – 4.4 på figur 13.1 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 optimal overensstemmelse mellem observeret og beregnet afhængig variabel. Dette fører til definitionen af objektiv funktionen (f.eks. summen af afvigelses kvadrater, lign. (12.5)), 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 beskrevet i detaljer her, idet der henvises til kapitel 14. 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 vil der være større chance for at finde optimale parameterestimer 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 parameterestimer, at være ustabile eller ikke at konvergere. Disse problemer skyldes ofte en uhensigtsmæssig 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 parameterestimer. Det kan anbefales at kombinere metoderne, så der indledes med grovkalibrering ved anvendelse af manuel kalibrering, og afsluttes med invers kalibrering til finkalibrering.

13.4 PRÆSENTATION AF KALIBRERINGSRESULTAT

13.4.1 *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 13.1 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 (12.3) – (12.7) 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.

13.4.2 *Parameterestimer samt deres usikkerhed*

De optimerede parameterverdier skal præsenteres, typisk i tabelform, men også en grafisk illustration af parameterverdierne 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 13.2.1) 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 13.3.2. Herved opnås et udtryk for modellens følsomhed overfor de analyserede parametre, og usikkerheden på parameterverdien 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 sensitivitetsanalyse, 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 konfidensintervaller.

13.4.3 *Overensstemmelse mellem observationer og simulering*

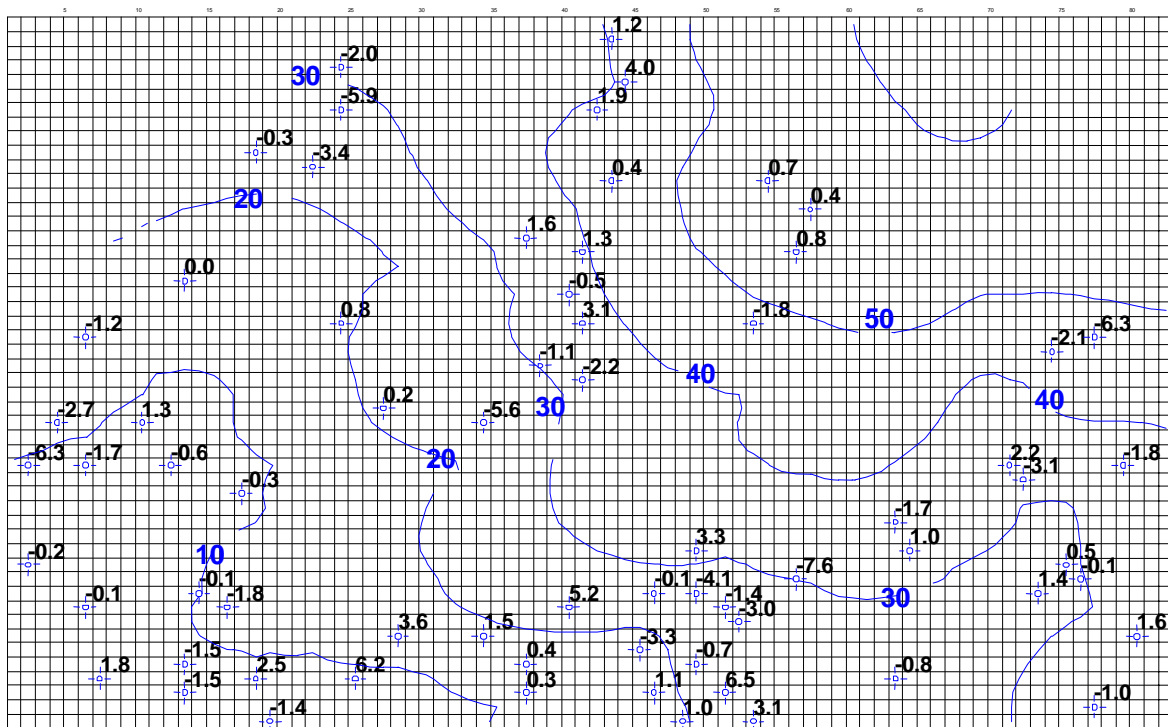
Kalibreringsresultatet skal altid afrapporteres i henhold til de kriterier, der er opstillet til arbejdet. Hvis der eksempelvis er stillet krav til maksimumverdier af ME og RMS, vil det være passende at præsentere de opnåede værdier eventuelt i tabelform, hvor det kan vises, hvor godt modellen simulerer de målte værdier i modelområdet. I tabel 13.1 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 13.1 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 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

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 residualerne på denne vis, og præsentationer af denne type hører bedst hjemme i et appendiks til kalibreringsrapporten (om end resultaterne skal kunne findes). Den rumlige fordeling af modelresultaterne kan bedre vurderes ud fra et eller flere af følgende fire illustrationer. (1) Konturplot, (2) scatterplot, (3) residualplot eller (4) fejlniveauplot.

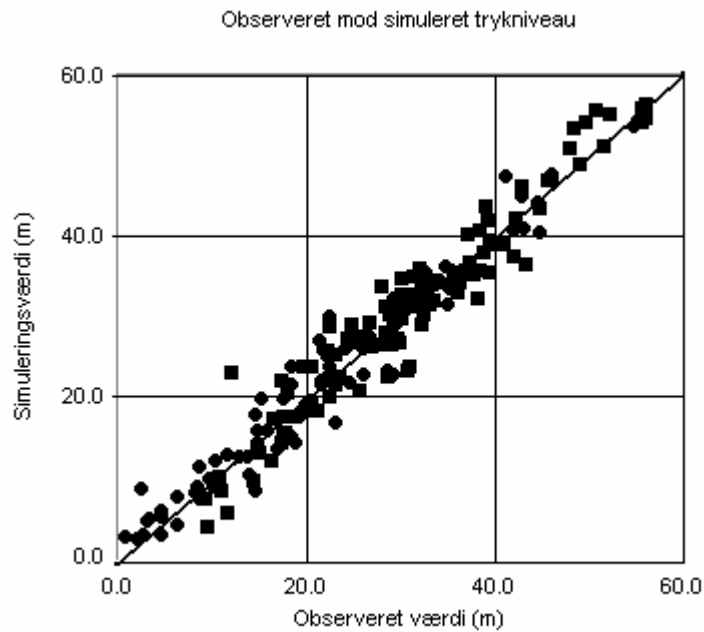
Figurer, der viser konturerede billeder af hhv. simuleret og observeret trykniveau, kan give et umiddelbart indtryk af, hvor godt modellen simulerer data. Imidlertid kan det være svært at vurdere afvigelseernes størrelse, ligesom der kan opstå store fejl i interpolationen af målte værdier. Det kan derfor være et bedre alternativ at vise modelresultatet som konturerede trykniveauer, og de observerede værdier indirekte som punktværdier, hvor afvigelsen mellem observeret og simuleret værdi præsenteres, som eksemplificeret i figur 13.5.



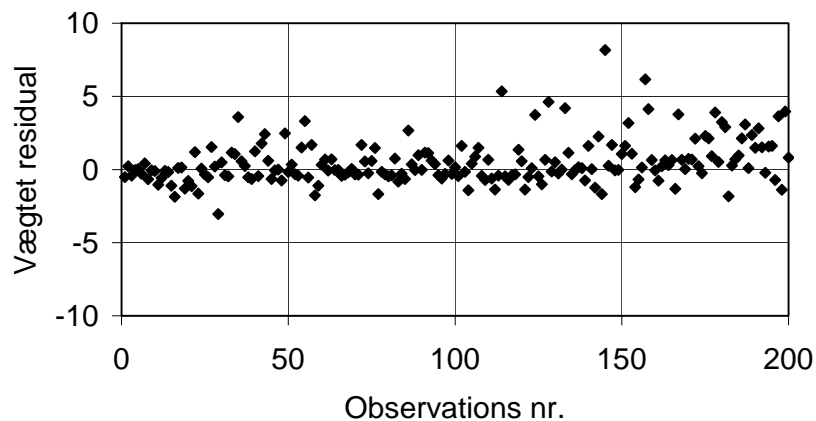
Figur 13.5 Plot fra Esbjergmodellen med konturerede simulerede trykniveauer (konturlinier) og punkter med afvigelser (residualer).

Scatterplot (spredningsgraf) viser observeret mod simuleret tilstandsvariabel, se figur 13.6. En perfekt overensstemmelse mellem model og data svarer til, at punkterne falder på en ret linie med en hældning på 45°. Afvigelser fra den rette linie skal være tilfældigt fordelt hhv. over og under linien. I modsat fald kan der være tale om systematiske modelfejl, eksempelvis at høje trykniveauer konsekvent simuleres for højt eller lavt. Hvis observationsdata er behæftet med samme usikkerhed, bør datapunkternes spredning omkring den rette linie være konstant.

Residualplot er en illustration af de beregnede afvigelser mellem observationsværdierne og simuleringsværdierne som funktion af eksempelvis observationsnummer. Hvis residualerne normeres med den estimerede usikkerhed på observationsdata fremkommer der såkaldte vægtede residualer, se figur 13.7. De vægtede residualer kan sammenlignes indbyrdes, og det vil derfor være muligt at identificere områder eller variabeltyper, som er behæftet med stor fejl. I eksemplet vist i figur 13.7 ses, at der er en del observationer mellem observationsnummer 110 og 160, der er dårligt simuleret.

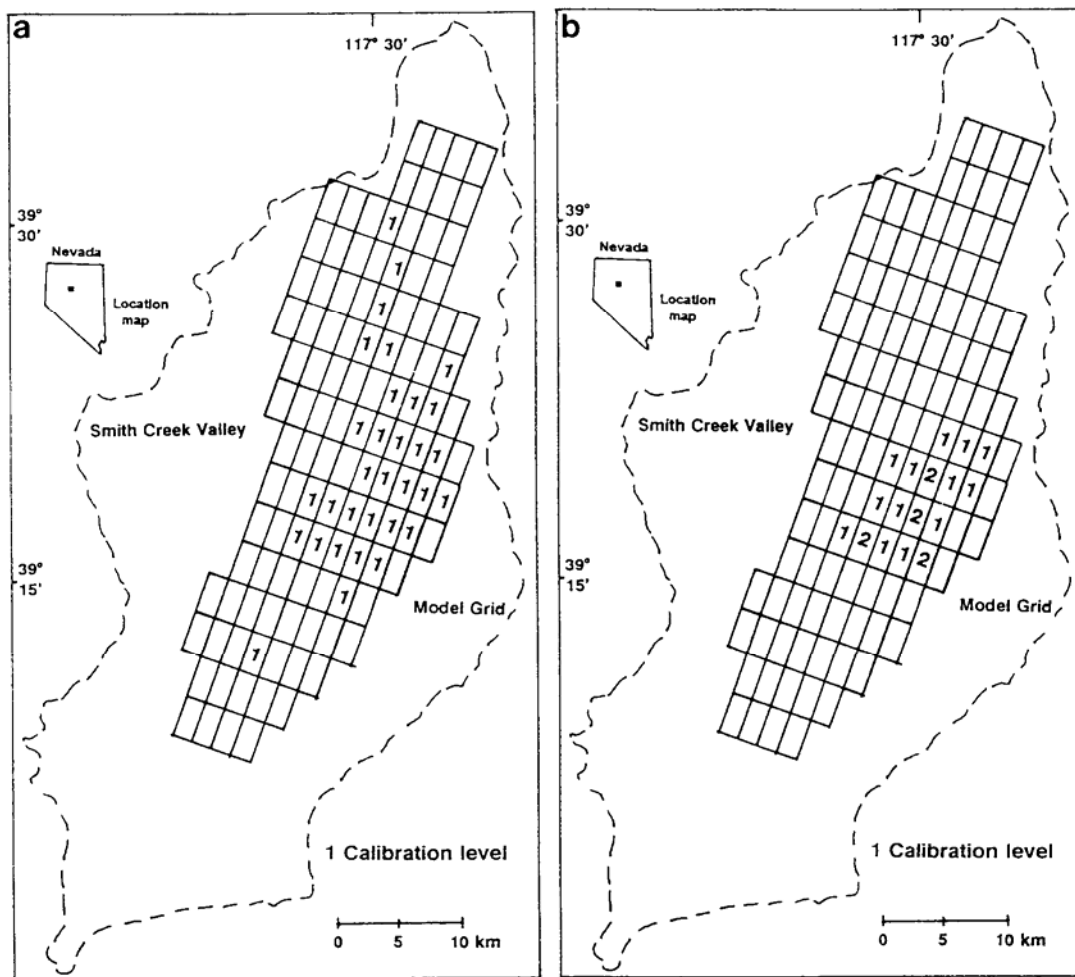


Figur 13.6 Scatterplot af simuleret mod observeret trykniveau (Esbjergmodellen, Appendiks A).



Figur 13.7 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 at 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 13.8.



Figur 13.8 Fejlniveauer for hhv. hydraulisk trykniveau (til venstre) og gradienten på hydraulisk trykniveau (til højre) for et grundvandsmagasin (fra Anderson & Woessner, 1992).

13.5 REFERENCER

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

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.

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 14 INVERS MODELLERING

Torben Obel Sonnenborg
Geologisk Institut, Københavns Universitet

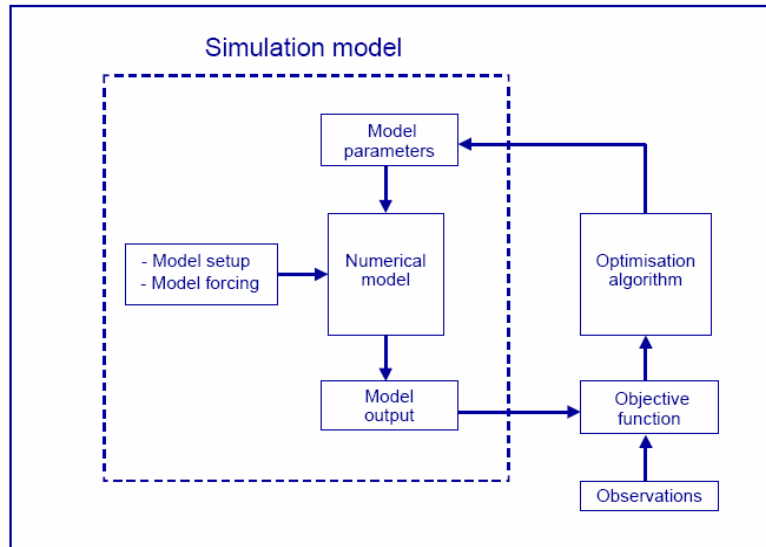
Anker Lajer Højberg
Hydrologisk Afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Objektivfunktion, vægtning af residualer, optimeringsalgoritmer, parameterusikkerhed og –korrelation, vurdering af kalibreringsresultat.

ABSTRACT: Invers modellering, ofte også benævnt automatisk parameterestimation eller invers modellering, involverer flere kritiske valg og kan ved u hensigtsmæssig brug resultere i dårlige resultater. Opstilling af objektiv funktionen, der er den størrelse, som den inverse model vil forsøge at minimere ved at justere parameterværdierne, er et af de kritiske skridt i automatisk parameterestimation. Det skal specificeres, hvordan observationer af samme type og observationer af forskellige type skal vægtes indbyrdes og i forhold til hinanden. Optimeringsalgoritmen, der skal minimere den definerede objektiv funktion, er et andet vigtigt valg i parameterestimationen. I dette kapitel præsenteres en global metode og en lokal metode, hvor vægten lægges på sidstnævnte. Problemer med lokale minima og manglende entydighed beskrives, og der angives retningslinier for, hvordan problemerne kan minimeres. Desuden beskrives problemer med estimation af urealistiske parameterværdier. Et eksempel illustrerer, hvordan valg af observationsdata, vægtning af disse data, og parametrisering påvirker resultaterne fra den inverse optimering. Endelig gives nogle retningslinier for, hvilke spørgsmål der bør stilles, når resultaterne fra den inverse model skal evalueres.

14.1 INDLEDNING

Poeter & Hill (1997) opfordrede i artiklen ”Inverse models: A necessary next step in ground-water modeling” til øget brug af automatisk parameteroptimering i forbindelse med grundvandsmodellering. Som argumenter for at bruge invers modellering anfører Poeter & Hill, at metoden har evnen til at (1) automatisk at finde de parametre, der giver den bedste overensstemmelse mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau og vandflukse, (2) kvantificere kvaliteten af kalibreringen, (3) identificere mangler og behov mht. observationsdata, (4) beregne konfidensintervaller på de estimerede parametre, (5) identificere parameterkorrelation og sensitivitet af parametre, og (6) tilvejebringe et objektivt grundlag for sammenligning af forskellige konceptuelle modeller. Siden Poeter & Hills artikel udkom, er automatiske optimeringsalgoritmer blevet indbygget i de fleste modelsystemer på markedet (f.eks. Groundwater Vistas, GMS, MIKE SHE), hvilket gør det relativt let at foretage invers optimering. Sideløbende hermed stilles der i større og større grad krav om anvendelse af automatiske kalibreringsmetoder fra vandressourceforvalternes side. Dette har gjort, at inverse metoder i dag anvendes ekstensivt f.eks. i forbindelse med modellering af indsatsområder. Det er imidlertid ikke altid, at de inverse metoder anvendes lige hensigtsmæssigt, og oftest udnyttes kun en lille del af den information, en invers model potentielt kan give brugeren. Det er f.eks. sjældent, at informationen i de seks punkter anført ovenfor bliver udnyttet samtidigt i de opgaver der udføres i Danmark.



Figur 14 Ramme for automatisk kalibrering, hvor sammenhængen mellem simuleringsmodellen og optimeringsalgoritmen ses (fra Madsen & Jacobsen, 2002).

Automatisk (eller invers) parameteroptimering kan illustreres som vist på figur 14.1. Den inverse model består af følgende elementer:

1. en numerisk kode (f.eks. MODFLOW)
2. den hydrogeologiske tolkningsmodel ("model setup" eller konceptuel model – indgående strømningselementer, randbetingelser, etc.) samt påvirkninger ("model forcing" – nedbørsinput, oppumpning, vandudledning, etc.)
3. parametrisering og valg af kalibreringsparametre
4. observationsdata
5. kalibreringskriterium (objektiv funktion)
6. optimeringsalgoritme

I dette kapitel vil der blive fokuseret på punkterne 5 og 6, idet de øvrige punkter er behandlet andre steder i håndbogen. Retningslinier for modelkalibrering vha. invers modellering er desuden beskrevet udførligt i Hill (1998), hvor der bl.a. er anført en checkliste på 16 punkter, som beskriver god kalibreringspraksis. I forhold til sidstnævnte reference vil der her blive fokuseret på nogle af problemerne ved anvendelse af automatisk parameterestimation.

14.2 KALIBRERINGSKRITERIUM (OBJEKTIV FUNKTION)

I automatisk parameterestimation skal der defineres et enkelt udtryk, som kan minimeres vha. en matematisk/numerisk optimeringsalgoritme. Dette udtryk kaldes også for objektiv-funktionen, G , som er et mål for afvigelsen mellem en observeret og simuleret variabel fra det modellerede system. Normalt defineres G som en vægtet sum af kvadratet på residualerne $r_i = \psi_{\text{obs},i} - \psi_{\text{sim},i}$, hvor $\psi_{\text{sim},i}$ er den simulerede værdi af $\psi_{\text{obs},i}$, og ψ er en variabel fra grundvandssystemet

$$G(\underline{b}) = \sum_{i=1}^n w_i r_i^2 \quad (14.1)$$

\underline{b} er vektoren af kalibreringsparametre, som i forbindelse med grundvandsmodellering primært vil være sammensat af hydrauliske ledningsevner for forskellige lag og zoner, vandløbskonduktivitet (lækagekoefficient), drænkonduktivitet (drænkoefficient), samt eventuelt randbetingelser såsom

værdien af trykniveauet på en rand med fastholdt tryk eller grundvandsdannelsen til modellen. Endelig er w_i vægtningen af det enkelte residual. Residualerne kan være baseret på forskellige datatyper, f.eks. hydraulisk trykniveau eller vandløbstilstrømning, og det er derfor mest hensigtsmæssigt at differentiere mellem residualer af samme type og residualer af forskellige type, da vægtningen vil være forskellig alt efter om der er tale om vægtning indenfor datatype eller mellem datatyper. I de to efterfølgende afsnit behandles hhv. vægtning indenfor og mellem datatyper.

14.2.1 Vægtning indenfor datatyper

I dette afsnit antages, at der kun indgår én type observation i G , f.eks. data for hydraulisk trykniveau, og det er derfor kun vægtningen af de enkelte residualer, w_i , der skal kvantificeres.

Vægtningen kan foretages på mange forskellige måder. Den ene ekstrem består i subjektivt at tildele observationer, hvor man ønsker en nøjagtig simulering, høje vægte, mens observationer, hvor der ikke er behov for en nøjagtig reproduktion af de observerede værdier, tildeles lave vægte. Som modsætning til denne fremgangsmåde kan det forsøges at estimere usikkerheden på de enkelte residualer (summen af observationsfejl og modelleringsfejl), hvilket anbefales stærkt f.eks. i Hill (1998) og Hill & Tiedeman (2002). Teoretisk set er det fornuftigt at tildele en lille vægt til et residual, hvis der er stor usikkerhed om f.eks. den observerede værdi, da det ikke er rimeligt at tilstræbe en nøjagtig simulering af en observationsværdi, der er stor usikkerhed på. Når der udføres manual kalibrering, kan den slags overvejelser foretages implicit, idet hydrogeologen, der udfører kalibreringen, bevidst eller ubevidst vil bruge mindre energi på at tilpasse modellen i områder, hvor f.eks. målingerne af hydraulisk trykniveau er af ældre dato, eller hvor der ikke er information tilgængelig om filtersætning. Med den automatiske optimeringsalgoritme er det ligeledes muligt at foretage en lignende afvejning af usikkerhederne, ved at kvantificere disse og give dem som input til modellen i form af vægte på de enkelte residualer. En ofte anvendt metode er at tildele residualerne en vægt, der er omvendt proportional med variansen på fejlen på residualerne, σ^2

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (14.2)$$

Problemet ved at tildele vægte på baggrund af usikkerheder er, at det kan være vanskeligt at kvantificere hhv. observationsfejl og modelfejl. Observationsfejlen består af faktorer som måleusikkerhed, barometereffekt, og kote fejl (se kapitel 15, Kalibrering af strømningsmodel), og det vil i de fleste tilfælde være muligt at komme med et kvalificeret bud på disse typer af fejl. Modelfejlen består af elementer som diskretiseringsfejl, manglende modellering af geologisk heterogenitet (udtrykt ved den rumlige variation i hydraulisk ledningsevne), samt manglende viden om den arealdistribuerede grundvandsdannelse. Effekten af geologisk heterogenitet på usikkerheden i modelleret trykniveau er en af de vigtigste modelusikkerheder og er beskrevet i kapitel 11 (Skalaforhold og heterogenitet). Denne usikkerhed kan kvantificeres f.eks. vha. udtryk (11.16), hvis der er en tilstrækkelig datamængde til rådighed om hydraulisk ledningsevne til at de geostatistiske egenskaber for K kan bestemmes.

Usikkerheden på grundvandsdannelsen er den størrelse, som det er sværest at håndtere. Dels er det vanskeligt at kvantificere usikkerheden på grundvandsdannelsen, dels er det vanskeligt at kvantificere, hvordan usikkerheden på grundvandsdannelsen forplanter sig til en usikkerhed på hydraulisk trykniveau. Gelhar (1993) behandler emnet, men kommer ikke frem til generelle udtryk for usikkerheden på hydraulisk trykniveau, som det er tilfældet for effekten af heterogenitet i hydraulisk ledningsevne. Gelhars analyse giver imidlertid en indikation af, at grundvandsdannelsen er en vigtig faktor for usikkerheden på hydraulisk trykniveau. Det må forventes, at grundvandsmagasiner tæt på jordoverfladen (typisk frie magasiner) vil være mere påvirket af denne effekt end dybereliggende magasiner. Det må ligeledes forventes, at grundvandsdannelsen til magasiner, der er overlejret af komplekse geologiske formationer som f.eks. moræneforekomster, og hvor terrænet er stærk kuperet, vil være behæftet med betydelig større usikkerhed end grundvandsdannelsen til magasiner med relativ homogen geologi og fladt terræn.

De fleste datasæt for hydraulisk trykniveau vil have en uensformig rumlig fordeling. Typisk finder der mange målinger i områder med store vandindvindingsinteresser, og der kan derfor være en

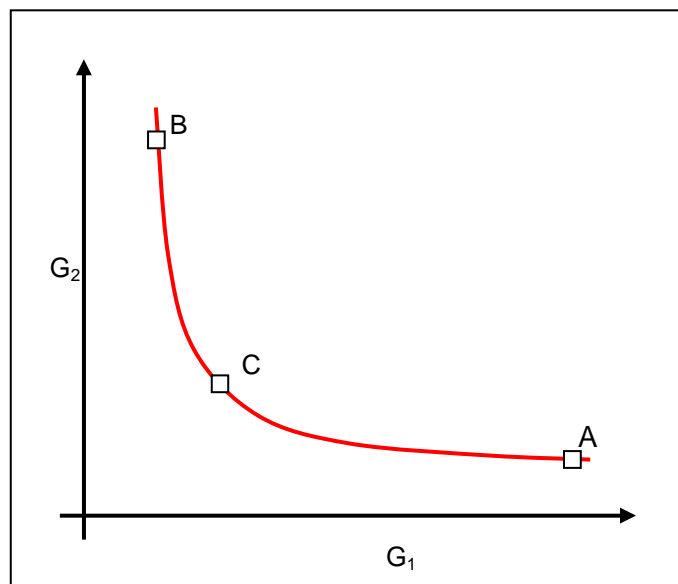
tendens til, at disse målinger kommer til at styre optimeringen i højere grad end informationsværdien i målingerne berettiger til. Det skyldes, at når målingerne er klumpet sammen ("clustering"), må det forventes, at de er positivt korrelerede, hvilket betyder, at hvis den ene måling stiger vil en nærliggende måling ligeledes stige. Derfor kan det være berettiget og hensigtsmæssigt for optimeringen at tildele målinger i områder med mange observationer en mindre vægt end en uafhængig analyse af fejlene på målingen og modelresultaterne på målelokaliteten vil resultere i. Da der ikke på forhånd er viden om korrelationen mellem målingerne, må vægtningen foretages ad hoc, og må eventuelt foretages iterativt idet der gennemføres flere inverse optimeringer med forskellige vægtninger.

Som den ovenstående gennemgang viser, vil en kvantificering af vægtene på baggrund af usikkerheden på residualerne ikke kunne gennemføres uden en vis brug af mere eller mindre subjektive overvejelser. Alligevel kan det anbefales, at usikkerheden estimeres, da det dels tvinger hydrogeologen til at tage stilling til kvaliteten af de enkelte observationer, og da det dels giver en plausibel vægtning af de enkelte residualer. Eventuelt kan vægtning på basis af usikkerheder kombineres med en subjektiv vægtning, hvor residualer beliggende i områder med stor interesse vægtes højere end områder med lille fokus. Dette svarer til, at man accepterer en større modelfejl i områderne med lille fokus, da hverken grundvandsdannelsen eller variationen i hydraulisk ledningsevne her beskrives i detalje. Eksempelvis vil man forvente en relativ upræcis reproduktion af det hydrauliske trykniveau i områder, hvor heterogene grundvandsmagasiner beskrives vha. store homogene enheder. Det kan derfor forventes, at den resulterende RMS-værdi bliver relativt høj, da effekten af småskalheterogeniteter ikke fanges af modellen. Der skal imidlertid stadig stilles krav til en fornuftig middelfejl (f.eks. ME-værdi), da det kan være vigtigt for det tilgrænsende fokusområde, at området fungerer som en fornuftig randbetingelse.

14.2.2 Vægtning mellem forskellige datatyper

Ofte er det både muligt og hensigtsmæssigt at kalibrere mod mere end én type observationsdata. F.eks. kan der ud over trykniveaudata være vandløbsafstrømning, Q , stofkoncentration, C , eller dateringer af grundvandets alder, T , til rådighed. Hvis de enkelte residualer vægtes med usikkerheden på observationen, vil de vægtede residualer være dimensionsløse, og det vil derfor være uproblematisk at beregne summen af de kvadrerede residualer og minimere denne størrelse. Normalt vil der imidlertid være flere målinger til stede af den ene type observation end den anden, og der vil derfor være en måske utilsigtet tendens til, at den type data, som der er flest observationer af, vil dominere optimeringen.

Problemet kan illustreres vha. figur 14.2, hvor G_1 og G_2 kan være objektivefunktioner for hhv. trykniveau og vandløbsafstrømning



Figur 14.2 Illustration af Pareto-fronten i et tilfælde med to objektivefunktioner G_1 og G_2 . Punktet A angiver en optimering, hvor kun type 2 observationer er anvendt, B angiver et tilfælde hvor kun type 1 observationer er anvendt, men C angiver et balanceret optimum baseret på begge typer informationer.

$$G_1 = \sum_{i=1}^n w_i (h_{obs,i} - h_{sim,i})^2$$

$$G_2 = \sum_{i=1}^m w_i (Q_{obs,i} - Q_{sim,i})^2$$
(14.3)

Kurven på figur 14.2 angiver minimum af funktionen

$$G = v_1 G_1 + v_2 G_2$$
(14.4)

hvor $0 \leq v_i \leq 1$ og $\sum v_i = 1$. Punktet A er G 's minimum, hvis der kun inddrages observationer af vandløbsafstrømningen i optimeringen ($v_1 = 0$; $v_2 = 1$), mens punktet B svarer til en optimering, hvor der kun bruges observationer af trykniveau i optimeringen ($v_1 = 1$; $v_2 = 0$). Alle andre punkter på kurven, der forbinder A og B, repræsenterer optimum af G for forskellige valg af v_1 og v_2 , og betegnes Pareto-fronten. Hvor på Pareto-fronten man ønsker at befinde sig er et subjektivt valg og afhænger af den givne problemstilling. Hvis begge observationstyper tillægges lige meget vægt, vil det være hensigtsmæssigt at kunne ramme punktet C, som kan betegnes som et balanceret optimum. Det er imidlertid ikke på forhånd muligt at bestemme værdierne af v_1 og v_2 , der sikrer, at punkt C rammes. Teoretisk set skal hele Pareto-fronten estimeres i hver konkret problemstilling, før det balancerede optimum kan bestemmes. I praksis kan det imidlertid resultere i et uoverkommeligt antal modelsimuleringer, og denne fremgangsmåde vil derfor ikke være mulig generelt.

En anden og meget pragmatisk måde at finde en passende vægtning af forskellige datatyper på, består i først at bestemme punkt A og B på figur 14.2. Det kræver, at der gennemføres to inverse kørsler, hvor der hhv. kun optimeres mod trykniveaudata og vandløbsafstrømning. Her ud fra kan følgende vægte bestemmes

$$v_i = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n G_{i,j}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n G_{i,j}}$$
(14.5)

hvor $G_{i,j}$ er den optimale værdi af objektivfunktionen for datatype i i optimeret udelukkende på basis af datatype j .

Hopmans et al. (2002) har foreslået, at der vægtes med antallet af observationer, som er til rådighed indenfor de forskellige datatyper

$$v_i = 1 - \frac{N_i}{N}$$
(14.6)

hvor N_i er antallet af observationer af datatype i og N er det totale antal observationer, $N = \sum N_i$. Denne vægtning forudsætter dels, at de indgående residualer har samme dimension (evt. er dimensionsløse), dels at alle observationer indenfor de enkelte datatyper indeholder lige meget information. Sidstnævnte antagelse vil oftest ikke være opfyldt, da observationer foretaget på visse lokaliteter vil have større værdi end andre steder. Eksempelvis vil en trykniveauobservation fra en boring placeret tæt på en fastholdt trykniveau-rand være af mindre værdi for optimeringen end en observation placeret i midten af modelområdet. Hvis der er relativt mange observationer i et område, vil værdien af hver enkelt observation sandsynligvis være mindre end en observation fra et datafattigt område. Ligning (14.6) vil dog kunne give et kvalificeret estimat af, hvordan de enkelte datatyper skal vægtes.

Hvis G_1 og G_2 (givet ved udtryk (14.3), hvor $w_i = 1/\sigma_i^2$) er bestemt til hhv. 45 og 8 i en situation, hvor der kun er optimeret mod 110 trykniveauobservationer, og G_1 og G_2 er bestemt til hhv. 67 og 4 i en optimering, hvor der kun er anvendt 3 afstrømningsobservationer, fås vha. (14.5) $v_1 = 0.1$ og

$v_2 = 0.9$. Havde (14.6) været anvendt ville de tilsvarende vægte være blevet estimeret til $v_1 = 0.03$ og $v_2 = 0.97$.

I praksis vil det ofte være nødvendigt at anvende trial-and-error metoden for at bestemme en hensigtsmæssig vægtning mellem forskellige datatyper, hvor forskellige vægte specificeres, og resultaterne vurderes successivt. I dette tilfælde er det ikke nødvendigt, at de enkelte residualer er dimensionsløse, da forskellen mellem den numeriske værdi af residualer af forskellig type kan vurderes manuelt. Anvendelse af udtryk (14.5) kræver ligeledes ikke, at der arbejdes med dimensionsløse residualer (eller residualer med samme dimension).

Nogle modelsystemer giver kun mulighed for at angive én vægt på hver observation, og i dette tilfælde er det nødvendigt at multiplicere vægtene v og w med hinanden og indsætte resultatet som vægtningen af observationspunkterne.

14.2.3 Brug af a priori information

Observationer af parametre, der skal estimeres, kan også inddrages i optimeringen. Normalt defineres en ny objektiv funktion af følgende form

$$G_b = \sum w_i (b_{obs,i} - b_i)^2 \quad (14.7)$$

hvor $b_{obs,i}$ er den observerede værdi af parameteren b_i . G_b omtales ofte som en "penalty function", da optimeringen bliver "straffet", hvis parameteren b_i bevæger sig for langt væk fra den observerede værdi. En penalty funktion kan forhindre estimation af urealistiske parametre og afhjælpe problemer med manglende entydighed (Carrera & Neuman, 1986). Til gengæld skal man være påpasselig, når der skal specificeres observationsværdier for en parameter. Som beskrevet i kapitel 4, er målinger af hydrauliske ledningsevne skalaafhængige og det vil derfor være fejlagtigt at anvende f.eks. en K-værdi baseret på slugtest som apriori parameter i en model, der arbejder på oplandsskala. Hvis de målte data svarer til modelleringsskalaen er der stadig risiko for, at de tilgængelige punktmålinger ikke er repræsentative for de parameterzoner, der er defineret under parametriseringen af modellen. Samlet må det anbefales at anvende målinger af parametre i optimeringen af modellen med stor forsigtighed. Der er i litteraturen stor uenighed om, hvorvidt a priori information skal medtages i objektiv funktionen. Uenigheden strækker sig fra helt at undgå det (Ginn & Cushman, 1990) til anbefalinger om, at det kan styrke optimeringen betragteligt (Carrera & Neuman, 1986). Alternativt kan observationer af parametre anvendes til at identificere realistiske intervaller for den pågældende parameter, indenfor hvilket det må forventes at den estimerede parameter skal ligge.

14.3 OPTIMERINGSALGORITMER

Objektivfunktionen G givet ved (14.1) kan i matrix-notation skrives som

$$G(\underline{b}) = \underline{r}^T \underline{w} \underline{r} \quad (14.8)$$

hvor $\underline{\bullet}$ angiver en vektor og $\underline{\underline{\bullet}}$ angiver en matrice. For et simpelt eksempel med blot 5 trykni-
veauobservationer, hvor de 3 første observationer har en standardafvigelse på 2 m og de to sidste har en standardafvigelse på 3 m fås (vægtene antages omvendt proportionale med variansen)

$$\underline{r} = \begin{bmatrix} h_{obs,1} - h_{sim,1} \\ h_{obs,2} - h_{sim,2} \\ h_{obs,3} - h_{sim,3} \\ h_{obs,4} - h_{sim,4} \\ h_{obs,5} - h_{sim,5} \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{w}} = \begin{bmatrix} (1/2)^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1/2)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (1/2)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1/3)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1/3)^2 \end{bmatrix} \quad (14.9)$$

Idet vægtningsmatricen kun består af diagonalelementer antages det implicit, at trykniveauobservationerne er indbyrdes uafhængige.

Matematisk formuleret skal optimeringsalgoritmen finde den kombination af parameterværdier, der minimerer G

$$\hat{\underline{b}} = \text{Min}\{G(\underline{b})\} \quad (14.10)$$

hvor $\hat{\underline{b}}$ er vektoren af parameterestimater, der resulterer i, at G bliver mindst muligt. Der findes forskellige typer af algoritmer, der er udviklet til dette formål. Overordnet kan de inddeles i globale og lokale metoder (Sooroshian & Gupta, 1995). De lokale metoder er designet til at finde minimum for objektivfunktioner, hvis værdi kontinuert aftager mod et enkelt minimum. De globale metoder er designet til at finde minimum for objektivfunktioner, der har mere end et hul, og hvor der derfor er en risiko for at havne i et lokalt minimum. I det følgende vil kun de mest almindelige algoritmer blive kort beskrevet. Mht. til den globale metode drejer det sig om den såkaldte Suffle complex evolution algoritme (modul i MIKE SHE), mens der for den lokale metode er tale om de gradient-baserede metoder, som kendes fra f.eks. MODFLOW2000, PEST og UCODE.

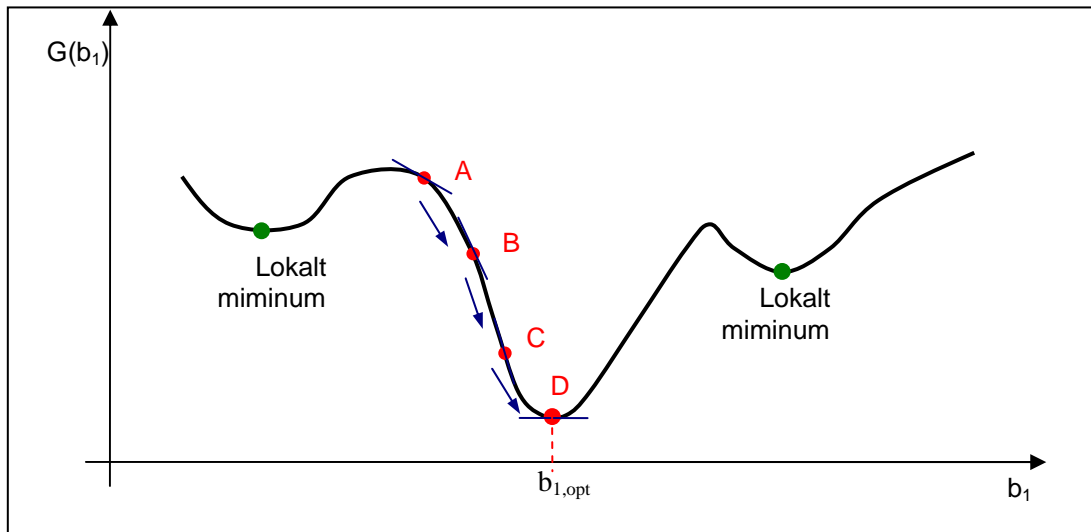
14.3.1 Suffle complex evolution method (SCE-metoden)

Indenfor grundvandsmodellering benyttes der primært lokale, gradientbaserede optimeringsalgoritmer til automatisk modeloptimering. Optimeringsalgoritmen i MIKE SHE er dog en undtagelse fra denne tendens, idet der her anvendes en global optimeringsalgoritme ved navn suffle complex evolution method (Duan et al., 1992; Madsen, 2000). Denne metode benytter sig af en i princippet relativt simpel strategi. Initielt samples der et antal (N) tilfældige parameterkombinationer i et på forhånd defineret parameterum (f.eks. givet ved minimum og maksimum for hver kalibreringsparameter), og modellen eksekveres for alle parameterudfaldene. I næste iteration udvælges igen N parameterudfald, men denne gang samples der mere målrettet i omegnen af det parameterudfald, der i første iteration gav den bedste overensstemmelse mellem observerede og simulerede værdier. Således fortsætter optimeringen indtil optimeringen konvergerer. SCE metoden er lidt mere avanceret end beskrevet ovenfor, idet der kan defineres et antal "complexes", dvs. grupper, således at optimeringen efter første iteration forløber i flere grupper, der kan køre i separate retninger, hvorved der er mindre risiko for at havne i et lokalt minimum.

SCE-metoden er designet til at optimere meget ikke-lineære problemstillinger, hvor det kan forventes, at objektivfunktionen er plaget af et eller flere lokale minima. Eksempelvis kan det forventes, at modeller der indeholder den umættede zone vil være stærkt ikke-lineære. Ligeledes vil fuldt integrerede hydrologiske modeller (med eller uden en fysisk beskrivelse af den umættede zone) have relativt stor chance for at være stærkt ikke-lineære. I forhold til de nedenfor beskrevne gradientmetoder, er der større chance for at optimeringen finder et globalt minimum, men til gengæld skal der også benyttes flere modelsimuleringer, når SCE-metoden benyttes.

14.3.2 Gradientbaserede metoder

I de gradientbaserede metoder minimeres G ved funktionsanalyse, idet nulpunktet for den afledede af G søges iterativt. Figur 14.3 illustrerer i det simple tilfælde med kun en parameter, hvordan



Figur 14.3 Illustration af princippet i de gradientbaserede metoders optimering. De korte liniestykker, der tangerer kurven, repræsenterer gradienten af objektivfunktionen G.

optimeringen principielt forløber. Optimeringen påbegyndes f.eks. i punktet A, og for at finde en lavere værdi af objektivfunktionen G, bestemmes hældningen af G i punktet. Herved findes retningen i hvilken modelparameteren skal justeres. Herefter flyttes parameteren til punkt B, en ny hældning findes, og optimeringen fortsættes på denne iterative måde, indtil hældningen af G er nul, og det derfor må antages, at objektivfunktionens minimum er fundet.

Til bestemmelse af, hvordan modelparametrene skal ændres i hver iteration beregnes den såkaldte Jacobi-matrice, J, som indeholder sensitivitetskoefficienterne

$$\frac{\partial \psi_{sim,i}}{\partial b_i} \tag{14.11}$$

De enkelte sensitivitetskoefficienter angiver, hvor meget simuleringsværdien $\psi_{sim,i}$ ændrer sig, når parameteren b_i ændres. En stor sensitivitetskoefficient er udtryk for, at den simulerede værdi ændrer sig meget når den pågældende parameter ændre størrelse. Parameteren har med andre ord stor indflydelse på simuleringen af f.eks. hydraulisk trykniveau i det pågældende punkt.

I eksemplet med 5 observationer af hydraulisk ledningsevne og 3 parametre fås følgende Jacobi-matrice

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_{sim,1}}{\partial b_1} & \frac{\partial h_{sim,1}}{\partial b_2} & \frac{\partial h_{sim,1}}{\partial b_3} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial h_{sim,5}}{\partial b_1} & \frac{\partial h_{sim,5}}{\partial b_2} & \frac{\partial h_{sim,5}}{\partial b_3} \end{bmatrix} \tag{14.12}$$

Præcisionen af beregningen af sensitivitetskoefficienterne i Jacobi-matricen er af afgørende betydning for en gradientbaseret metode. UCODE og PEST anvender en forward eller central approksimation til beregning af sensitivitetskoefficienterne givet ved

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial b_j} \cong \frac{\psi_i(b_j + \Delta b_j) - \psi_i(b_j)}{\Delta b_j} \quad \text{forward}$$

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial b_j} \cong \frac{\psi_i(b_j + \Delta b_j) - \psi_i(b_j - \Delta b_j)}{2 \Delta b_j} \quad \text{central}$$
(14.13)

Central-approximationen har større præcision end forward approximationen, men til gengæld kræver det dobbelt så mange eksekveringer af grundvandsmodellen at beregne central-approximationen. Den bedste præcision opnås ved brug af den såkaldte "sensitivity-equation" metode, som er indbygget i MODFLOW2000 (Hill et al., 2000).

Med en gradientbaseret metode opnås de bedste resultater, hvis G er en kontinuert funktion, der varierer gradvist med parametrene. Dette vil være tilfældet for artesisk grundvandsstrømning, men der findes en lang række tilfælde, hvor G er diskontinuert. F.eks. vil inaktivering af celler i et frit magasin, der pga. små ændringer i parameterværdierne kommer til at ligge over grundvandsspejlet, resultere i en markant ændring af trykniveauresponset, som følgende kan have en u hensigtsmæssig effekt på beregningen af sensitivitetskoefficienterne. Aktivering af drænflow, når trykniveauet overstiger en forudbestemt værdi, eller aktivering af overfladeafstrømning, når trykniveauet overstiger terrænkoten er andre mere fysiske eksempler på diskontinuerte reaktioner i hydrologiske modeller. I sådanne tilfælde vil det være svært for en gradientbaseret metode at bestemme dels retningen og størrelsen af ændringen i parametervektoren \underline{b} .

Som det ses af figur 14.3 afhænger optimeringen af den skitserede objektivfunktion med en gradientbaseret metode af værdien af det initiale parameterestimat. Hvis optimeringen startes i punkt A, vil det globale minimum blive fundet, men hvis optimeringen påbegyndes enten til venstre eller højre for dalen, hvor det globale minimum befinder sig, vil metoden resultere i et lokalt minimum. De gradientbaserede metoder er derfor bedst egnede til forholdsvis lineære problemstillinger.

UCODE og PEST, som er de mest anvendte generelle optimeringsmodeller indenfor grundvandsmodellering, er begge gradientbaserede metoder, og er mht. de basale antagelse og algoritmer meget ens. I PEST foretages der en mere raffineret bestemmelse af den skridtlængde de enkelte parametre tager i hver iteration, hvilket kan resultere i en hurtigere konvergens end det er tilfældet for UCODE. Desuden er det i PEST muligt at angive grænser for det interval, de enkelte parametre må bevæge sig indenfor under optimeringen. Herved kan urealistiske parameterestimer undgås, og denne facilitet gør, at PEST bliver foretrukket frem for UCODE af nogle brugere.

14.4 ENTYDIGHEDSPROBLEMER

Manglende entydighed ("non-uniqueness") optræder, når ét sæt observationsdata, f.eks. hydrauliske trykniveaudata, fra det betragtede system kan resultere i mere end en invers løsning mht. parametrene \underline{b} . Dette kan forekomme i principielt set to forskellige situationer. I den ene situation er det muligt at simulere det samme respons ved anvendelse af forskellige parametersæt. Dette vil eksempelvis være tilfældet, hvis to parametre er perfekt korrelerede, og der derfor findes et uendeligt antal kombinationer af de to parametre, der resulterer i nøjagtigt samme trykniveaufordeling og dermed også i samme værdi af objektivfunktionen G . Der er med andre ord mulighed for at generere det samme trykniveaubillede og derfor også samme strømningssituation med forskellige kombinationer af modelparametrene. Problemet er imidlertid, at modeller parametriseret med de forskellige parametersæt vil reagere forskelligt på f.eks. nye randbetingelser og påvirkninger af systemet (oppumpning, dræning, etc.), og modellen er derfor uegnet til at lave prediktioner med.

Den anden type af manglende entydighed optræder, hvis flere forskellige parameterkombinationer giver samme G -værdi, men ikke nødvendigvis samme trykniveaufordeling. Dette svarer til, at der er flere stort set lige dybe huller i objektivfunktionen, hvor overensstemmelsen mellem observeret og simuleret respons er lige god, men hvor residualerne er fordelt forskelligt. Denne situation

benævnes også "equi-finality", og kan opstå i selv velformulerede problemstillinger, hvor der ikke er problemer med manglende parameter-sensitivitet eller høj parameterkorrelation. De forskellige løsninger vil generere forskellige strømningssystemer, som vil resultere i forskellige resultater mht. variable, som der ikke er blevet kalibreret imod. Hvis der f.eks. kun kalibreres mod observationer af hydraulisk trykniveau, vil de alternative parametersæt resultere i simulering af forskellig tilstrømning til vandløb, forskellige opholdstider i de enkelte magasiner, etc. Derfor vil inddragelse af andre typer af observationsdata i kalibreringsprocessen ofte kunne afhjælpe problemet med manglende entydighed, da der pga. de ekstra data lægges flere bånd på optimeringen, og antallet af mulige løsninger indsnævres – i bedste fald til kun en enkelt.

Risikoen for manglende entydighed øges, når antallet af kalibreringsparametre stiger. Derved forøges sandsynligheden for, at optimeringen resulterer i et sæt parameterestimer, der ikke er i overensstemmelse med virkeligheden. Hvis en model parametriseret med et sådant parametersæt udsættes for en valideringstest, er der stor sandsynlighed for at der opnås et dårligt valideringsresultat. Et eksempel på dette problem ses i figur 15.1 i kapitlet om validering, hvor der genereres utilfredsstillende valideringsresultater, når antallet af parametre bliver for højt.

Manglende entydighed vil med sikkerhed optræde, hvis der estimeres flere parametre, end der er observationsdata til rådighed. Det er imidlertid ikke tilstrækkeligt blot at kræve, at antallet af observationsdata er større end antallet af kalibreringsparametre for at opnå entydighed. Værdien af den enkelte observation vil bl.a. afhænge af placering og nøjagtighed, og der kan derfor ikke opstilles generelle retningslinier for sammenhængen mellem antallet af observationsdata, der er til rådighed for optimeringen, og antallet af parametre der entydigt kan estimeres.

Der kan imidlertid gives nogle anbefalinger for, hvordan entydighed bedst muligt tilstræbes (bl.a. Carrera & Neuman, 1986; Hill, 1998):

- Minimering af fejlen (usikkerheden) på observationsdata
- Anvendelse af flere forskellige typer data og dermed objektivfunktioner
- Basere parametriseringen (f.eks. afgrænsning af zoner, indenfor hvilke parametrene er homogene) på geologiske og andre fysiske tolkninger, der retfærdiggør den valgte opdeling af systemet i parameterzoner. Herved minimeres risikoen for at parameterestimationen reduceres til en ren datafitningsøvelse.
- Anvendelse af logaritmisk transformeret hydraulisk ledningsevne, da det minimerer graden af ikke-linearitet mellem modelparametre og trykniveau (Carrera & Neuman, 1986)
- Tilstræbe højst mulig sensitivitet af modelparametrene. Dette er der flere muligheder for:
 - Det er vigtigt at foretage et hensigtsmæssigt valg af kalibreringsparametre, der ikke resulterer i en eller flere usensitive parametre. Dette vil ofte betyde, at antallet af kalibreringsparametre skal holdes relativt lavt.
 - Det kan ligeledes anbefales at anvende specificeret fluks (eller gradient) frem for specificeret trykniveau som modelrandbetingelse, da det resulterer i højere parametersensitiviteter.

14.5 PARAMETERUSIKKERHED

Fordelen ved at anvende en statistisk baseret invers model er, udover at opnå forhåbentligt optimale parameterestimer, at der bestemmes en række statistiske størrelser for de estimerede parametre. Afhængig af, hvor mange antagelser der er opfyldt, kan der uddrages mere eller mindre information om parametrenes statistiske egenskaber.

Kovariansmatricen på de estimerede parametre $\hat{\underline{b}}$ kan beregnes som (Hill, 1998)

$$\text{Cov}(\hat{\underline{b}}) = s^2 \left[\underline{\underline{J}}^T \underline{\underline{w}} \underline{\underline{J}} \right]^{-1} \quad (14.14)$$

hvor s^2 er den såkaldte estimations-varians ("calculated error variance" eller "goodness of fit")

$$s^2 = \frac{1}{N_{obs} - N_b} G(\hat{b}) = \frac{1}{N_{obs} - N_b} \left[\underline{r}^T \underline{w} \underline{r} \right] \quad (14.15)$$

Udtryk (14.14) er udledt under antagelse om linearitet mellem modelparametre og modelrespons (f.eks. hydraulisk trykniveau) omkring de optimale parametre \hat{b} , hvilket ikke er opfyldt mht. grundvandsstrømning. Desuden antages det, at residualerne r_i er tilfældigt fordelt og ukorrelerede, hvilket også kan være svært at opfylde i praksis. Udtryk (14.14) er derfor en approksimation til den sande kovariansmatrice, og det kan forventes, at udtrykket generelt vil underestimere den sande usikkerhed på parametrene.

Indsættes (14.15) i (14.14) fås

$$\begin{aligned} Cov(\hat{b}) &= \frac{1}{N_{obs} - N_b} \left[\underline{r}^T \underline{w} \underline{r} \right] \left[\underline{J}^T \underline{w} \underline{J} \right]^{-1} \\ &= \frac{1}{N_{obs} - N_b} \left[\underline{r}^T \underline{r} \right] \left[\underline{J}^T \underline{J} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (14.16)$$

Det ses af (14.16), at den estimerede kovariansmatrice udelukkende afhænger af residualerne $r(\hat{b})$ og Jacobi-matricen \underline{J} , som indeholder sensitivitetskoefficienterne. Intuitivt ville man forvente, at parameterusikkerheden afhænger af den usikkerhed, som de benyttede observationsdata påhæftes. Dette er imidlertid ikke tilfældet, da observationsusikkerheden alene udnyttes i estimationen af parametre via deres plads i vægtningsmatricen \underline{w} . Alt andet lige vil parameterusikkerheden øges, når residualerne r_i vokser, mens den vil blive reduceret, når parametersensitiviteten øges. Som det ses af udtryk (14.16) er der omvendt proportionalitet mellem parameterusikkerheden og parametersensitiviteten, hvilket betyder, at parametre, der har stor indflydelse på simuleringen af observationsdataene (høj sensitivitet), er godt bestemt og derfor tillægges en lille varians.

Det ses også, at præcisionen af sensitivitetskoefficienterne i Jacobimatricen \underline{J} er specielt vigtig i denne forbindelse, idet de multipliceres parvis og summeres for at beregne kovariansmatricen.

For tilfældet med 3 parametre fås en kovariansmatrice af formen

$$Cov(\hat{b}) = \begin{bmatrix} Var(b_1) & Cov(b_1, b_2) & Cov(b_1, b_3) \\ Cov(b_2, b_1) & Var(b_2) & Cov(b_2, b_3) \\ Cov(b_3, b_1) & Cov(b_3, b_2) & Var(b_3) \end{bmatrix} \quad (14.17)$$

hvor $Var(b_i)$ er variansen på parameter nr. i og $Cov(b_i, b_j)$ er kovariansen mellem parameter nr. i og j . Kovariansmatricen er symmetrisk, dvs. $Cov(b_i, b_j) = Cov(b_j, b_i)$. Korrelationsmatricen fås tilsvarende til

$$Cor(\hat{b}) = \begin{bmatrix} 1 & \frac{Cov(b_1, b_2)}{(Var(b_1)Var(b_2))^{0.5}} & \frac{Cov(b_1, b_3)}{(Var(b_1)Var(b_3))^{0.5}} \\ \frac{Cov(b_2, b_1)}{(Var(b_2)Var(b_1))^{0.5}} & 1 & \frac{Cov(b_2, b_3)}{(Var(b_2)Var(b_3))^{0.5}} \\ \frac{Cov(b_3, b_1)}{(Var(b_3)Var(b_1))^{0.5}} & \frac{Cov(b_3, b_2)}{(Var(b_3)Var(b_2))^{0.5}} & 1 \end{bmatrix} \quad (14.18)$$

Korrelationen mellem de enkelte parametre kan ligge i intervallet [-1; 1]. Hvis korrelationen er tæt på 1 (numeriske værdi), er de to parametre stærkt korreleret. Det er i dette tilfælde tvivlsomt, om der kan opnås entydige estimater af de to parametre, da det kun er forholdet mellem dem, som har

betydning for resultatet. Ifølge Hill et al. (1998) kan korrelationskoefficienter på over 0.95 give problemer med entydigheden.

Konfidensintervaller på de estimerede parametre kan under forudsætning om normalfordelte residualer beregnes vha. (Hill, 1998)

$$b_i \pm t\left(n, 1.0 - \frac{\alpha}{2}\right) s_{b_i} \quad (14.19)$$

ved et signifikansniveau på α , hvor $t(\cdot)$ er t-fordelingen, og s_{b_i} er standard afvigelsen for parameter nr. i . For et signifikansniveau på 5%, svarende til et 95% konfidensinterval, fås for $n \rightarrow \infty$, at $t(\infty, 0.975) = 1.960$, mens den tilsvarende værdi på 32% niveau, svarende til et 68% konfidensinterval, er på 0.995. Hvis der er mange observationsdata til rådighed i forhold til antallet af parametre (30 eller derover) vil man (approsimativt) med 68% sikkerhed kunne sige, at parameter b_i vil ligge i intervallet $[b_i - s_{b_i}; b_i + s_{b_i}]$, mens der er 95% sikkerhed for, at parameteren vil ligge i intervallet $[b_i - 2s_{b_i}; b_i + 2s_{b_i}]$.

Variationskoefficienten, C_v , givet ved

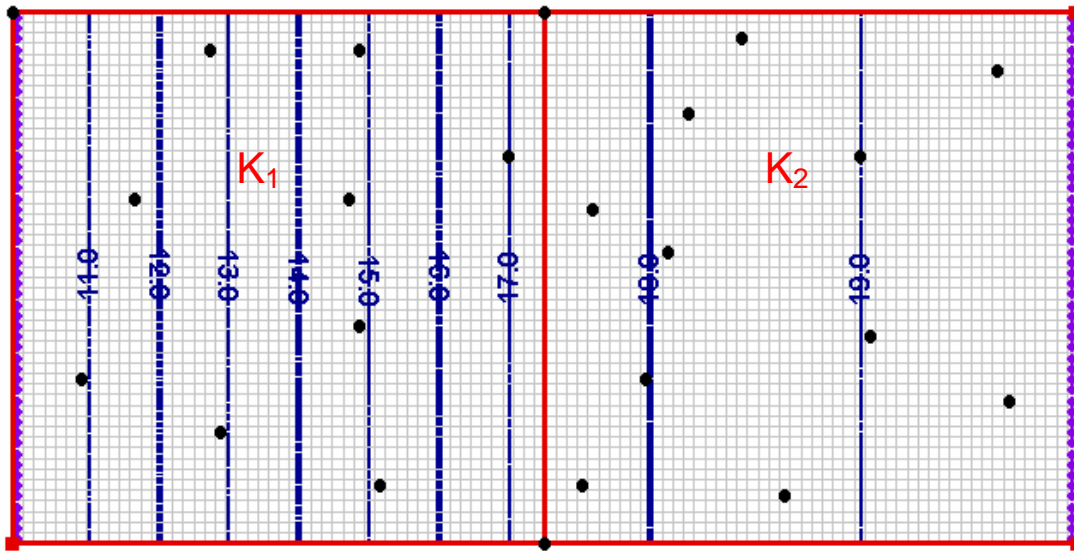
$$C_v = \frac{\sqrt{\text{Var}(\hat{b}_i)}}{\hat{b}_i} = \frac{s_{b_i}}{\hat{b}_i} \quad (14.20)$$

er et udtryk for den relative usikkerhed på et parameterestimat. En variationskoefficient $C_v \leq 1.0$ vil normalt betyde, at parameteren er godt bestemt. Hvis $C_v > 10$ vil det i nogle tilfælde være mere hensigtsmæssigt at bestemme parameteren ud fra forhåndsviden frem for at estimere den vha. optimeringsalgoritmen. Et 95% konfidensinterval for en parameter med $C_v = 10$ er approsimativt givet ved $[b_i - 20 b_i; b_i + 20 b_i]$, hvilket indikerer, at parameteren er relativt dårligt bestemt. I nogle tilfælde vil det være muligt at angive et mindre bredt interval for den sande værdi af parameteren ud fra erfaringsværdier og foreliggende undersøgelser. I så fald er der grund til at gentage optimeringen, hvor kun parametre, der kan estimeres præcist, medtages i estimationen.

14.6 EKSEMPEL

I figur 14.4 er et to-dimensionalt strømningssystem vist. Randbetingelserne består af fastholdt trykniveau på 10 m på den vestlige rand og fastholdt trykniveau på 20 m ved den østlige rand. Mod nord og syd er der impermeable grænser. Der er ingen grundvandsdannelse i området. Aquiferen simuleres som et artesisk magasin med en ensformig lagtykkelse på 10 m. Diskretiseringen i horisontal retning er på 200 m, mens der i vertikal retning benyttes et modellag. Fordelingen af hydraulisk ledningsevne er givet ved to lige store områder, hvor den vestlige ende har en ledningsevne på $K_1 = 8.64 \text{ m/d}$ ($1 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$), og den østlige ende har en ledningsevne, der er tre gange så stor, $K_2 = 26 \text{ m/d}$ ($3 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$). Der er defineret 20 observationspunkter jævnt fordelt over området, og i første omgang vil det ud fra disse 20 observationer af hydraulisk trykniveau (med en observationsusikkerhed svarende til en standardafvigelse på 0.5 m) blive forsøgt at estimere den hydrauliske ledningsevne i området vha. optimeringsprogrammet PEST.

I første omgang antages K at være homogen og horisontal isotrop. Initielt sættes $K = 1 \text{ m/d}$. I optimering nr. 1 kalibreres der kun mod de 20 trykniveau-observationer. Optimeringen resulterer i et estimat af K på 25 m/d med et 95% konfidensinterval på $[2.5 \cdot 10^{-299}; 1 \cdot 10^{300} \text{ m/d}]$, se tabel 14.1, dvs. K -værdien i systemet er praktisk talt ubestemmelig. Optimeringen konvergerer efter tre iterationer, hvilket er det antal iterationer, som PEST er blevet bedt om at foretage uden forbedringer i objektivværdien G . Der opnås nemlig ingen ændring i G , når K ændres, da trykniveaufordelingen er totalt uafhængig af den specificerede K -værdi. Trykniveaufordelingen i et system med fastholdte randbetingelser i opstrøms og nedstrøms ende og kun én K -værdi, er uafhængig af den valgte K -værdi, og ved nærmere eftersyn findes der meget små sensitiviteter og composite parameter sensitiviteter (se afsnit 14.8). Estimatet af K i denne opsætning er helt afhængig af hvilken K -værdi, der bruges som startværdi for optimeringen.



Figur 14.4 Illustration af setup. De røde linier angiver zonerings af hydraulisk ledningsevne. De sorte punkter angiver lokaliteter, hvor der er observationer af hydraulisk trykniveau. De blå linier er konturer af fordelingen af hydraulisk ledningsevne.

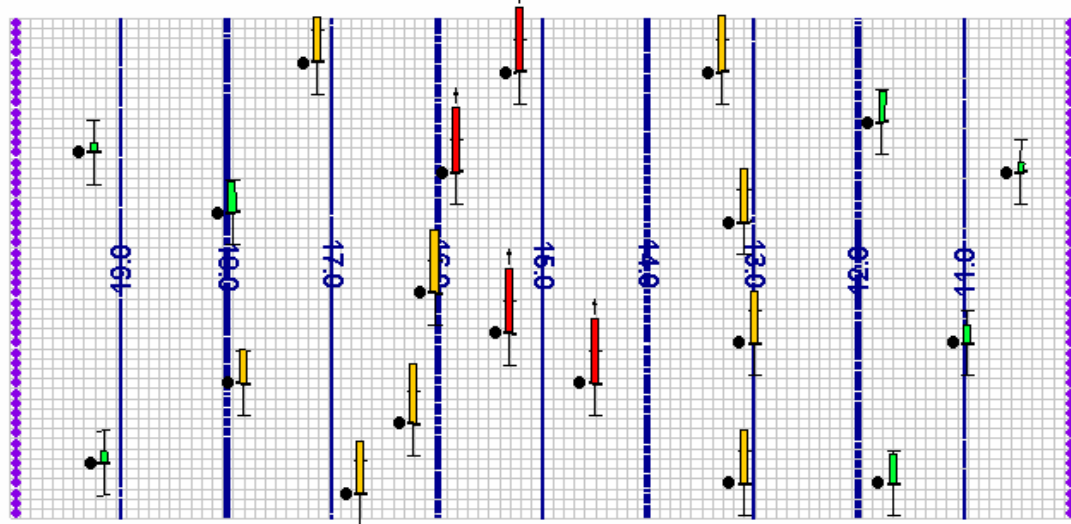
Det er derfor nødvendigt at bibringe optimeringen mere information, hvis der skal kunne estimeres entydige parametre. Ud fra den sande løsning kendes fluksen til nedstrøms rand i den vestlige ende af systemet, $Q = 655 \text{ m}^3/\text{d}$. Variationskoefficienten antages at være ca. 10% af afstrømningsmålingen, hvilket resulterer i en usikkerhed på afstrømningsmålingen, der svarer til en standardafvigelse på ca. $65 \text{ m}^3/\text{d}$. Inkluderes denne observation i optimeringen findes resultatet angivet under optimering nr. 2 i tabel 14.1. Der estimeres en hydraulisk ledningsevne, som ligger mellem de to sande værdier på 8.64 og 26 m/d, hvor de 13 m/d svarer til det harmoniske gennemsnit af de to værdier (strømning gennem serieforbindelse), hvorved den korrekte fluks til nedstrøms rand beregnes. Da den homogene K-værdi stadig ikke har nogen indflydelse på simuleringen af det hydrauliske trykniveau, findes den samme overensstemmelse mellem simuleret og observeret trykniveau, se figur 14.5.

Tabel 14.1 Resultater fra optimering af en enkelt homogen K-zone. SD angiver standardafvigelsen på observationerne, som benyttes i vægtningen af data.

Optimering nr.	Obs. Usikkerhed	K-estimat (m/d)	Lav 95% konf. Int. (m/d)	Høj. 95% konf. Int. (m/d)	RMS _h (m)
1	SD _h = 0.5 m	25.0	$2.5 \cdot 10^{-299}$	$1 \cdot 10^{+300}$	1.52
2	SD _h = 0.5 m; SD _Q = 65 m ³ /d	13.0	7.1	23.6	1.52
3	SD _h = 0.1 m; SD _Q = 65 m ³ /d	13.0	0.66	255.9	1.52
4	SD _h = 0.1 m; SD _Q = 13 m ³ /d	13.0	7.1	23.6	1.52

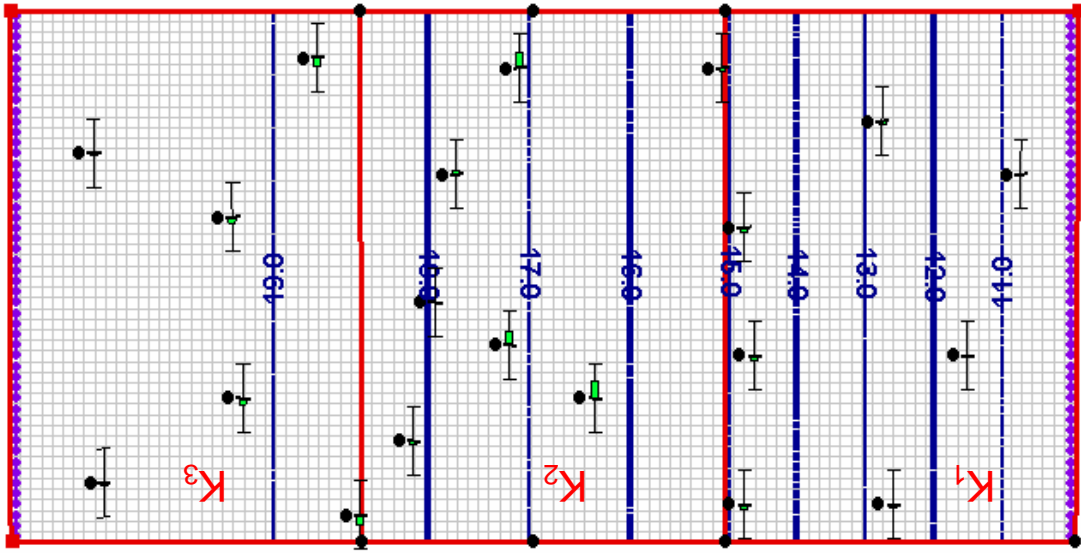
For at undersøge indflydelsen af vægtningen mellem trykniveauobservationerne og fluksobservationen, sættes standardafvigelsen på de observerede trykniveauer ned med en faktor 5 fra 0.5 m til 0.1 m. Optimeringen gentages og resultatet ses under optimering nr. 3 i tabel 14.4. Estimatet af K er stadig på 13 m/d som i optimering nr. 2, men 95% konfidensintervallet er nu betydeligt bredere, til trods for at usikkerheden på de observerede trykniveauer er reduceret. Dette tilsyneladende paradoksale resultat skyldes, at fluksobservationen nu tillægges relativt mindre vægt, og da det er

Fluksobservationen, der giver hele informationen til bestemmelsen af K , bliver konfidensintervallet bredere. Hvis standardafvigelsen på fluxobservationen også reduceres med en faktor 5 (fra 65 til $13 \text{ m}^3/\text{d}$), findes nøjagtigt samme resultat som angivet under optimering nr. 2. Det absolutte niveau af vægtningen af data har altså ingen betydning for estimationen af usikkerheder på kalibreringsparameterne, det er kun fordelingen af vægtene, der er afgørende.



Figur 14.5 Overensstemmelse mellem "observeret" og simuleret trykniveau for optimeringer nr. 1-4 (se tabel 14.1).

For at reproducere de observerede trykniveauobservationer bedre, besluttes det at definere tre zoner for hydraulisk ledningsevne, se figur 14.6. Både flux ved nedstrøms rand og de 20 trykobservationer benyttes som kalibreringsgrundlag (standardafvigelse på hhv. $65 \text{ m}^3/\text{d}$ og 0.5 m). Resultatet af optimeringen fremgår af tabel 14.2.



Figur 14.6 Illustration af setup for de inverse kørsler nr. 4 – 6, se tabel 14.1. De røde linier angiver zonerne af K . De blå linier er konturer af beregnet hydraulisk ledningsevne.

Tabel 14.2 Resultat af estimering af de tre K-zoner illustreret i figur 14.6. $RMS_h = 0.21$ m.

	K-Estimat (m/d)	95% konf. lav (m/d)	95% konf. høj (m/d)
K_1	8.4	7.6	9.2
K_2	12.4	11.0	14.1
K_3	31.7	26.6	37.7

Som det ses i tabel 14.2 resulterer optimering i fornuftige estimater af de hydrauliske ledningsevner. Den dårlige parametrisering, hvor K-zonerne ikke er i overensstemmelse med de sande K-zoner, resulterer imidlertid i, at estimatet af K_3 , som ligger helt inde i zonen med en sand hydraulisk ledningsevne på 26 m/d, er overestimeret, og selv 95% konfidensintervallet indeholder ikke den sande værdi.

Ofte vil der i praktiske situationer være betydelig usikkerhed om grundvandsdannelsen til modellen. Det forsøges derfor at estimere grundvandsdannelsen sammen med de tre K-parametre fra det ovenstående eksempel. Det skal nævnes, at der i dette tilfælde både introduceres en parametriseringsfejl (forkert zonerings af K) og en konceptuel fejl (forkert øvre randbetingelse). Eksemplet er imidlertid ikke urealistisk, da begge fejl ofte vil blive begået i virkelige tilfælde, uden at man er klar over det. Startværdien for grundvandsdannelsen sættes til $1 \cdot 10^{-4}$ m/d og resultatet af optimeringen ses i tabel 14.3.

Tabel 14.3 Resultat af estimering af de tre K-zoner illustreret i figur 14.6, samt en homogen grundvandsdannelse. $RMS_h = 0.20$ m.

	Estimat (m/d)	95% konf. lav (m/d)	95% konf. høj (m/d)
K_1	7.6	6.6	8.8
K_2	8.1	4.8	13.5
K_3	12.4	2.6	58.6
Grundv.dan.	$9.3 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-8}$	$1.9 \cdot 10^{-5}$

Grundvandsdannelsen estimeres relativt godt, idet den nærmer sig den sande værdi på nul. Til gengæld har inkluderingen af grundvandsdannelsen i optimeringen stor indflydelse på optimeringen af de hydrauliske ledningsevner. Specielt for K_3 opnås en værdi, der ligger langt fra den sande værdi på 26 m/d, og samtidig ses 95% konfidensintervallet at være betydeligt bredere end i det foregående eksempel. Årsagen til det relativt dårlige resultat kan findes ved at undersøge parameterkorrelationerne, se tabel 14.4.

Tabel 14.4 Korrelationsmatrice for kalibreringsparametrene anført i tabel 14.3.

	K_1	K_2	K_3	Grundv.dan.
K_1	1.0	0.79	0.78	-0.69
K_2	0.79	1.0	0.97	-0.95
K_3	0.78	0.97	1.0	-0.99
Grundv.dan.	-0.69	-0.95	-0.99	1.0

Der ses at være stor korrelation mellem grundvandsdannelsen og de hydrauliske ledningsevner, og korrelationen er specielt høj mht. K_3 , som både var svær at estimere og havde det brede konfidensinterval. Eksemplet illustrerer, hvordan høj parameterkorrelation resulterer i problemer med at bestemme entydige estimater af kalibreringsparametrene.

Det skal bemærkes, at der i de ovenstående eksempler kun er anvendt støjfri observationsdata, dvs. modellen er blevet kalibreret mod de sande værdier af hydraulisk trykniveau og fluks. I praksis vil disse data altid være fejlbehæftede i større eller mindre grad, hvilket vil forstærke problemerne med at estimere troværdige parameterverdier. Endelig skal det nævnes, at når den rigtige zonerings af K, dvs. to lige store zoner som vist i figur 14.2, gives som input til den inverse model, finder den automatiske kalibrering uden problemer frem til de sande værdier af K.

14.7 ANALYSE AF OUTPUT FRA INVERS MODEL

Et af de meget brugbare resultater, som en invers model kan tilvejebringe, er sensitiviteterne, som er de afledte af modelresultaterne i observationspunkter mht. kalibreringsparametrene. Sensitiviteterne i Jacobi-matricen (14.12) kan udnyttes på to måder. Hvis der foretages en summation af elementerne i en søjle i J findes en slags akkumuleret (eller "composite") parameter-sensitivitet, der angiver den samlede sensitivitet af den pågældende parameter. En parameter med stor sensitivitet vil have stor indflydelse på resultatet af modellens prediktioner i de punkter, hvor der er observationsdata til rådighed. F.eks. vil man oftest finde, at for højerpermeable enheder vil den vertikale hydrauliske ledningsevne være insensitiv, mens den horisontale hydrauliske ledningsevne vil være sensitiv. Omvendt forholder det sig normalt med lav-permeable enheder. Hvis sensitiviteterne i Jacobi-matricen summeres rækkevis, vil resultatet være en slags akkumuleret observations-sensitivitet, der angiver informationsværdien af den enkelte observation. En lille akkumuleret observations-sensitivitet betyder, at den pågældende måling ikke har ret stor betydning for bestemmelsen af kalibreringsparametrene. Omvendt betyder en stor akkumuleret observations-sensitivitet, at målingen er vigtig for estimation af parametrene.

UCODE/MODEFLOW2000 og PEST foretager beregningerne af de akkumulerede sensitiviteter på to forskellige måder. I UCODE/MODEFLOW2000 findes de såkaldte dimensionsløse skalerede sensitiviteter ("dimensionless scaled sensitivity"), ss_{ij}

$$ss_{ij} = \frac{\partial \psi_{sim,j}}{\partial b_i} \frac{b_i}{s_{jj}} \quad (14.21)$$

hvor $s_{jj} = 1/(w_{jj})^{0.5}$. Hvis vægtene w_{jj} specificeres som anført i (14.2), vil s_{jj} være lig standardafvigelsen på observation nr. j. En dimensionsløs skaleret sensitivitet fortæller om den enkelte observations informationsindhold mht. en enkelt parameter. Man kan også vælge at tolke ss som den enkelte parameters indflydelse på en enkelt observation.

Beregningen af "composite scaled parameter sensitivity" foretages som (idet vægtningsmatricen w antages at være en diagonal-matrice)

$$css_i = \sqrt{\frac{1}{N_{obs}} \sum_{j=1}^{N_{obs}} \left(\frac{\partial \psi_{sim,j}}{\partial b_i} \frac{b_i}{s_{jj}} \right)^2} \quad (14.22)$$

hvor N_{obs} er antallet af observationsdata. Der foretages, som beskrevet ovenfor, en søjlevis summation af (de kvadrerede) sensitiviteter i Jacobimatricen (14.12). I PEST beregnes tilsvarende der en "composite parameter sensitivity"

$$cps_i = \frac{1}{N_{obs}} \sqrt{\sum_{j=1}^{N_{obs}} \left(\frac{\partial \psi_{sim,j}}{\partial b_i} \frac{1}{s_{jj}} \right)^2} \quad (14.23)$$

der svarer til (14.22) ovenfor. Det ses, at cps ikke er dimensionsløs, da sensitiviteterne ikke multipliceres med parameterværdien, som det er tilfældet i (14.22).

Til forskel fra UCODE/MODEFLOW2000 bestemmes der i PEST også en "composite observation sensitivity", cos , som er givet ved

$$cos_j = \frac{1}{N_b} \sqrt{\sum_{i=1}^{N_b} \left(\frac{\partial \psi_{sim,j}}{\partial b_i} \frac{1}{s_{jj}} \right)^2} \quad (14.24)$$

hvor N_b er antallet af kalibreringsparametre. Udtryk (14.24) kvantificerer informationsværdien af observation nr. j. Som anført i Doherty (2000) skal man være opmærksom på, at en høj værdi af cos ikke nødvendigvis betyder, at observationen er meget vigtig for optimeringen. Hvis der f.eks. findes to observationer lige ved siden af hinanden, vil begge få beregnet en høj cos , men pga.

indbyrdes korrelation, vil informationsværdien af de to målinger tilsammen ikke svare til summen af deres akkumulerede (composite) observations-sensitivitet.

Det er vigtigt at pointere, at udpegelsen af vigtige parametre på baggrund af sensitivitetsanalyser, der udføres i kalibreringssituationen, ikke nødvendigvis kan overføres til prediktionssituationen. Hvis det er formålet at bestemme sænkningen som følge af installation af en ny kildeplads, kan det være, at simuleringen af sænkingskeglen omkring kildepladsen er sensitiv overfor nogle parametre, der ikke blev fundet sensitive i kalibreringssituationen. I dette eksempel skabes der i prediktionssituationen et andet strømningsfelt end det var tilfældet i kalibreringssituationen, og der er derfor en vis sandsynlighed for, at det er nogle andre parametre, der er vigtige i den nye situation. Ligeledes kan det være, at prediktionen af indvindingsoplande eller transporttiden til en eksisterende kildeplads er sensitiv overfor andre parametre end det blev konstateret under kalibreringen. I dette eksempel er strømningsfeltet i kalibrerings- og prediktions-situationen den samme, men det er nogle andre variable, der er fokus på, f.eks. er der en vis sandsynlighed for, at transporttiden til en kildeplads er sensitiv overfor nogle parametre, der ikke havde stor indflydelse på simuleringen af det hydrauliske trykniveau.

Det er derfor vigtigt at afrapportere resultatet af en sensitivitetanalyse foretaget med de optimale parameterestimater, så det er klart, hvilke parametre der er godt bestemt, og hvilke parametre, der er mindre godt bestemt. Dette vil for kalibreringsparametrene også fremgå af den estimerede parameterusikkerhed, f.eks. i form af 95% konfidensintervaller eller angivelse af den estimerede standardafvigelse. Desuden er det vigtigt, at der også gennemføres en sensitivitetanalyse eller følsomhedsanalyse i prediktionssituationen, for at finde frem til, hvilke parametre der er vigtige for simulering af de variable, der fokuseres på i denne situation. Såfremt der ikke er overensstemmelse mellem parametrene, der blev fundet sensitive i hhv. kalibreringssituationen og prediktionssituationen, er der grund til at være påpasselig, for i den situation skal der genereres simuleringsresultater med en model, hvor en eller flere af de vigtige parametre er dårligt bestemt. Dette er en vigtig information at viderebringe, så der kan blive ageret i henhold dertil. Det kan eventuelt blive besluttet på den foreliggende information at søge at tilvejebringe information om de parametre, som der er problemer med, hvis dette er fysisk og økonomisk muligt. Alternativt skal de producerede resultater tolkes med varsomhed, idet de sandsynligvis vil være behæftet med stor usikkerhed.

14.7.1 Urealistiske parameterestimater

Anvendelse af automatisk parameteroptimering resulterer til tider i estimation af urealistiske parameterverdier, hvor f.eks. den hydrauliske ledningsevne af et lerlag er urealistisk høj, den hydrauliske ledningsevne for et sandlag er lavere end for et siltlag eller vandløbskonduktiviteten i et sandet område er meget lille. Den slags problemer opstår normalt ikke, når der udføres manuel kalibrering, da hydrogeologen ikke vil afprøve urealistiske parameterkombinationer under kalibreringen.

Der kan være forskellige forklaringer på, at der estimeres urealistiske parametre. Dels kan optimeringen være blevet fanget i et lokalt minimum, og i det tilfælde vil overensstemmelsen mellem observerede og simulerede data sandsynligvis også være dårlig. En anden forklaring kan være, at optimeringen pga. entydighedsproblemer har konvergeret mod et minimum, der giver god overensstemmelse med observationsdata, men som resulterer i parameterverdier, der ikke er i overensstemmelse med virkeligheden. Dette problem svarer til, hvad der af Beven (1993) benævnes "equifinality", hvilket beskriver, at forskellige modeller kan resultere i repræsentationer af virkeligheden, som ikke kan afvises som utroværdige. I afsnit 14.3 er forskellige årsager til entydighedsproblemer beskrevet mere udførligt.

En tredje forklaring på urealistiske parameterestimer er, at der er fejl i den opstillede model (Poeter & Hill, 1996). Der kan f.eks. være tale om, at den konceptuelle model (hydrogeologisk tolkningsmodel) er fejlbehæftet, eller at der er foretaget en forkert parametrisering. Den inverse model vil forsøge at kompensere for disse fejl ved at tillægge kalibreringsparametrene værdier, der ikke er i overensstemmelse med det virkelige system. Urealistiske parameterestimater kan i dette tilfælde ikke forkastes under påskud af, at den inverse model ikke "virker". I stedet bør et sådant resultat anvendes konstruktivt, hvor resultaterne fra den inverse model analyseres (f.eks. fordeling af resi-

dualer i systemet og usikkerhedsestimater på parametrene) sammen med f.eks. den geologiske model eller den anvendte parametrisering i et forsøg på at finde evt. fejl i modelopsætningen.

Alternativt kunne flere forskellige modeller opstilles og sammenlignes på baggrund af primært (a) hvor realistiske de estimerede parametre anses for at være, (b) hvor god overensstemmelse der er med observationsdata (f.eks. RMS-værdi), samt (c) hvor tilfældigt residualerne er fordelt i modellen (Hill, 1998). På baggrund af de tre kriterier kan de alternative modeller rangordnes og nogle kan eventuel helt forkastes ud fra nogle på forhånd opstillede kriterier.

14.8 EVALUERING AF KALIBRERINGSRESULTAT

Reilly & Harbaugh (2004) anbefaler, at der tages stilling til følgende spørgsmål ved evaluering af, om en model er kalibreret tilstrækkeligt godt:

1. En den konceptuelle model (hydrogeologiske tolkningsmodel, parametrisering, etc.) for det betragtede system rimelig?
2. Er den matematiske repræsentation af randbetingelserne rimelige for formålet med opgaven?
3. Reproducerer det simulerede trykniveau og strømningsfordeling de vigtige aspekter af strømningssystemet, såsom størrelse og retning af trykniveaunkonturerne?
4. Er der en rimelig overensstemmelse mellem observeret og simuleret trykniveau og afstrømning (udtrykt ved kvantitative mål som f.eks. RMS-værdien) i forhold til formålet med undersøgelserne?
5. Fordeler residualerne sig ligeligt over modelområdet, dvs. er der en tilfældig fordeling af hhv. over- og under-prediktering af de observerede trykniveauer? Hvis det ikke er tilfældet, er der så en hydrogeologisk begrundelse for at ændre modellen og derved opnå en mere tilfældig rumlig fordeling af residualerne?

De to første spørgsmål er primært relateret til den konceptuelle forståelse af det betragtede system samt modelopsætningen for systemet. Disse spørgsmål er der normalt taget stilling til inden kalibreringen påbegyndes, men hvis det i løbet af kalibreringsprocessen viser sig, at det ikke er muligt at opnå en tilfredsstillende overensstemmelse med de observerede størrelser, vil det være naturligt at stille spørgsmålene igen, og eventuelt forsøge at korrigere den hydrogeologiske tolkningsmodel inkl. geologisk model og randbetingelser).

Specifikt for resultater af en invers kalibrering vil det være hensigtsmæssigt yderligere at stille følgende spørgsmål:

- A. Har de estimerede parametre rimelige størrelser, der ligger indenfor de forventede intervaller?
- B. Er de estimerede parameterusikkerheder og -korrelationer rimelige?
- C. Er der opnået et globalt minimum i den inverse kalibrering?

Det skal sandsynliggøres, at svarene på ovenstående spørgsmål er bekræftende. Hvis der ikke kan gives positive svar, skal det forklares, hvad der er årsag til de fundne problemer.

14.9 REFERENCER

Beven, K.J. (1993) Phophesy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling, *Adv. Water Resources*, 16, 41-51.

Carrera, J., and Neuman, S.P. (1986) Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 2. Uniqueness, stability, and solution algorithms, *Water Resources Research*, 22(2), 211-227.

Doherty, J. (2000) PEST, Model independent parameter estimation. *Watermark Numerical Computing*, Australia, 249 p.

Duan, Q., Sorooshian, S., Gupta, V. (1992) Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models, *Water Resources Research*, 28(4), 1015-1031.

Ginn, T.R., Cushman, J.H. (1990) Inverse methods for subsurface flow: A critical review of stochastic techniques, *Stochastic Hydrol. Hydraul.*, 4, 1-26.

Hill, M.C. (1998) Methods and guidelines for effective model calibration, U.S. Geological Survey, Water-Resources investigations Report 98-4005, 90 p.

Hill, M.C., Cooley, R.L., Pollock, D.W. (1998) A controlled experiment in groundwater flow model calibration, *Ground Water*, 36(3), 520-535.

Hill, M.C., Banta, E.R., Harbaugh, A.W., Anderman, E.R. (2000), MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey modular ground-water model – User guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter-estimation processes and three post-processing programs, U.S. Geological Survey, Open-file Report 00-184, 209 p.

Hill, M.C., Tiedeman, C.R. (2002) Weighting observations in the context of calibrating groundwater models, In: K. Kovar & Z. Hrkal (eds.), *Calibration and reliability in groundwater modeling: A few steps closer to reality*, ModelCARE 2002, IAHS Publication 277, 196-203.

Hopmans, J.W., Šimunek, J., Romano, N., Durner, W. (2002) Inverse methods, In: *Methods of soil analysis, Part 4, Physical methods*, Eds.: J.H. Dane & G.C. Topp, Soil Science Society of America, Inc., Madison, Wisconsin, USA, 963-1008.

Madsen, H. (2000) Automatic calibration of a conceptual rainfall-runoff model using multiple objectives, *J. Hydrology*, 235, 276-288.

Madsen, H. (2003) Parameter estimation in distributed hydrological catchment modeling using automatic calibration with multiple objectives, *Advances in Water Resources*, 26, 205-216.

Madsen, H., Kristensen, M. (2002) A multi-objective calibration framework for parameter estimation in the MIKE SHE integrated hydrological modeling system, In: *ModelCARE 2002, Proceeding of the 4th international conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modelling*, 6 p.

Madsen, H., Jacobsen, T. (2001) Automatic calibration of the MIKE SHE integrated hydrological modeling system, 4th DHI softwater conference, 20 p.

Poeter, P.P., and Hill, M.C. (1996) Unrealistic parameter estimates in inverse modeling: a problem or a benefit for model calibration? In: *Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, Proceeding of the Model CARE 96 Conference*, IAHS Publ. no. 237, 277-285.

Poeter, E.P., Hill, M.C. (1997) Inverse models: A necessary next step in ground-water modeling, *Ground Water*, 35(2), 250-260.

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, 116 p.

Poeter, E.P., Hill, M.C. (1999) UCODE, a computer code for universal inverse modeling, *Computers & Geosciences*, 25, 457-462.

Reilly, T.E., and Harbaugh, A.W. (2004) Guidelines for evaluating ground-water flow models, U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2004-5038, 30 p.

Sonnenborg, T.O. (2001) Kalibrering af strømningsmodel, Ståbi i grundvandsmodellering, Ed. Henriksen et al., 22. p.

Sorooshian, S., Gupta, V.K. (1995) Model calibration, In: Singh, V.P. (Ed.), Computer Models of Watershed Hydrology, Water Resources Publications, Colorado, 23-68.

Kapitel 15 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 begrundet 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.

15.1 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 mulig:

“ .. 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.

15.2 DEFINITION OG FORMÅL MED MODELVALIDERING

Som beskrevet i det indledende kapitel (tabel 1.1) 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.

15.3 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 den klassiske test, hvor de 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 felt-data. 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. naboer) 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*. Denne 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.

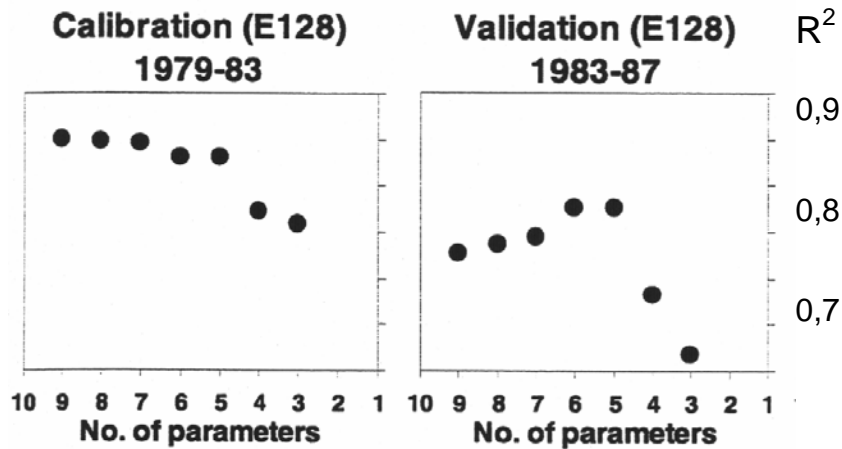
- *Proxy-basin, differential split-sample test*. Dette er den vanskeligste test for en hydrologisk model, fordi der ikke findes kalibreringsdata, og modellen skal benyttes til at vurdere en ændret fremtidig situation. Testet er en kombination af de to foregående. I praksis vil det formentlig være vanskeligt 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).

15.4 PRAKTISKE ASPEKTER I FORBINDELSE MED MODELVALIDERING

15.4.1 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 15.1.



Figur 15.1 Eksempel på en modells nøjagtighed i henholdsvis kalibrerings og valideringsperiode ved valg af forskelligt antal frie parameterværdier, som tilpasses under kalibreringen (Lidén, 2000)

Figur 15.1 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 15.1 stammer ikke fra grundvandsmodellering, men den principielle problemstilling er ligeså aktuel i grundvandsmodellering.

Konklusionen på ovenstående er ikke, at modellen ikke må have mange forskellige parameter-værdier. 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.

15.4.2 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 15.2. 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 jækknifning.

15.4.3 *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 Jayatilaka 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 boringer ikke er nær så nøjagtig til at simulere trykniveauer i andre boringer.

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 15.4.2 ovenfor.

15.5 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 15.3 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 1.2) 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 oprindeligt 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.

15.6 REFERENCER

- Ambrose, 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 16 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.

16.1 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 simplificeringerne 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.

16.2 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 simplificering 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.

16.2.1 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 grundvandspejlet, (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. (5.14), til at beskrive strømmingen 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 boksmode, 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 grundvandspejlets 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 grundvandspejlet står højt (f.eks. vådområder) og dybden til vandspejlet kan have stor indflydelse på størrelsen af den aktuelle fordampning.

16.2.2 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.

16.2.3 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. Herved 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 strømlinier, 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.

16.3 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 underkastet 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 kapitel 12), 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

simuleringsresultater, kan modellen derfor være troværdig til løsning af det aktuelle problem, hvorimod 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 15). 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 15). 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.

16.4 MODELANVENDELSE

16.4.1 *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. 5.6) 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.

16.4.2 *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 12.4.2). Modellen skal derfor ikke forventes at kunne beskrive eksempelvis ændringer i minimumsvandføring for vandløbsstræk-

ninger 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).

16.4.3 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 16.2.1 og 16.2.3). 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 vandbygningsværker (diger, dæmninger og andre konstruktioner).

16.5 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 17 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, sensitivitsanalyse, 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.

17.1 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. tidlig variation, påtrykte klimavariationer etc.); det er vigtigt her at specificere hvilke udtræk der skal foretages fra simuleringsscenarierne, fx påvirkning af trykniveau (afsækning), 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 klimatisk 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 rekvirenten. 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 simuleringsskørslers 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.

17.2 GRUNDEVANDSRESSOURCEVURDERING 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.

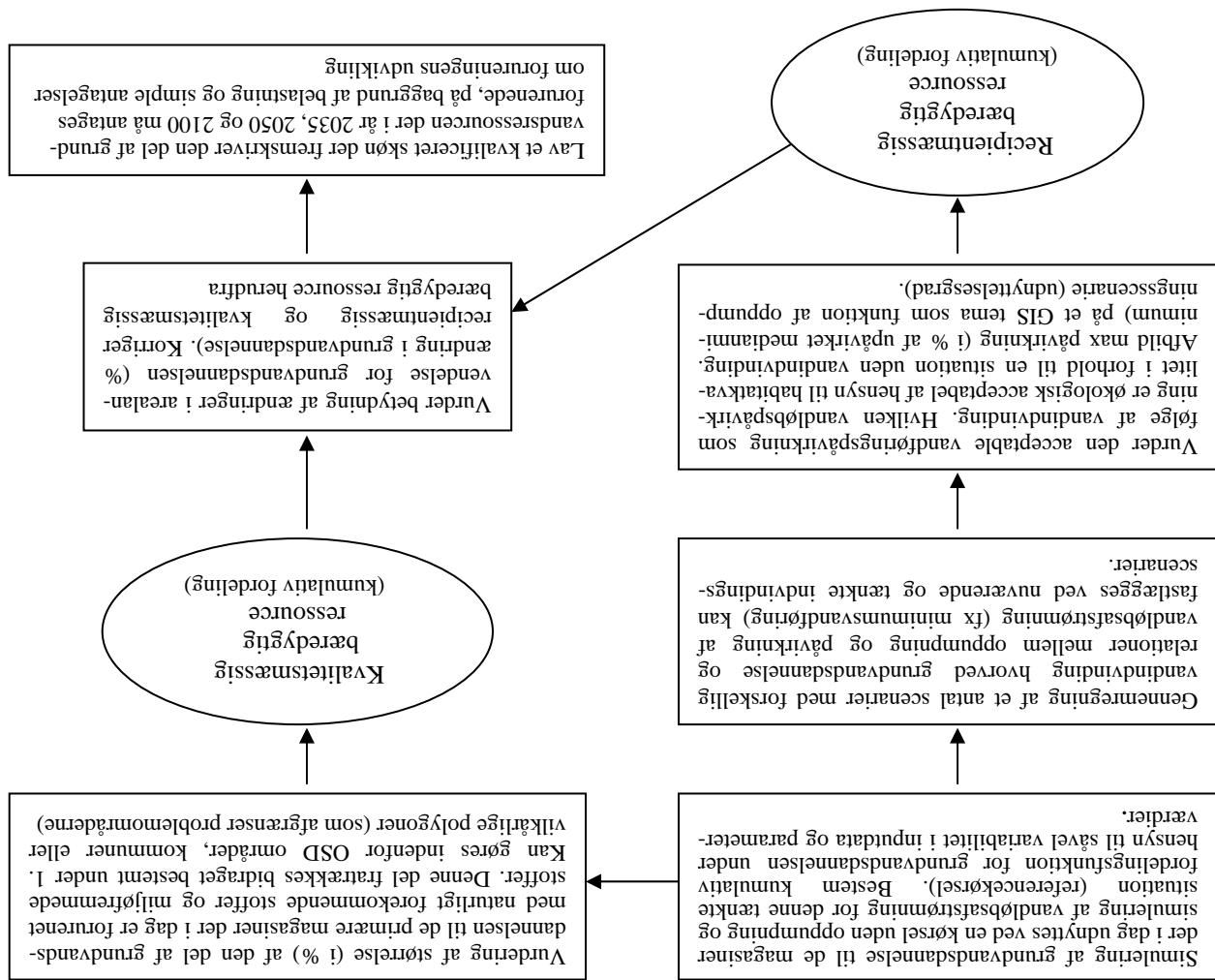
Simuleringer gennemføres ved at køre modellen frem med de tilpassede og kalibrerede parametre, og påtvinge modellen en hydrologisk belastning. Der kan her benyttes inputdata i form af fx nedbør- og fordampningstidsserier, der repræsenterer fremtidige klimaforhold, men det kan også vælges at genanvende 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 -optrængning 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-

Den her anbefalede metode er baseret på en massebalance for grundvandsystemet, hvor input (=grundvandsdannelse) bestemmes ud fra output (=opumpning + vandløbsafstrømning) + evt. underjordisk afstrømning til fx have). Kerne i en opgørelse af grundvandsressourcens størrelse er dermed en bestemmelse af "grundvandsdannelse" til de primære magasiner, hvortil størstedelen af vandindvindingen foretages. Der er imidlertid et problem ved denne metode, 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 vanskeligt 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 afsluttede 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 opumpning. Det giver følgende metode til vurdering af bæredygtig grundvandsressource:

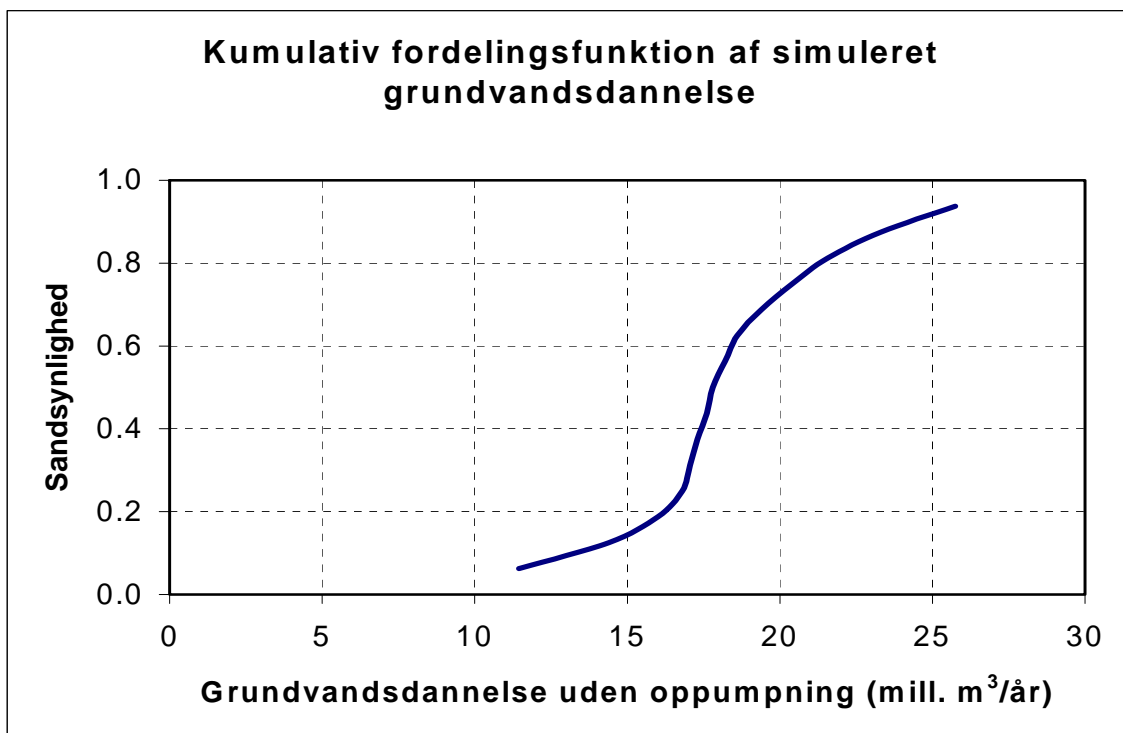


Figur 17.1 Vurdering af udnyttelig grundvandsressource

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 grundvandsdannelse (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 grundvandsdannelse med en given sandsynlighed (figur 17.2).



Figur 17.2 Eksempel på kumulativ fordelingsfunktion for grundvandsdannelsen her angivet i mio. m³/år (Middlemis, 2000). Kurven viser at der er ca. 10 % sandsynlighed for at grundvandsdannelsen er mindre end 13 mio. m³/år. Der er 10 % sandsynlighed for at grundvandsdannelsen er større end 24 mio. m³/år.

Den resulterende kumulative fordelingsfunktion, se figur 17.2, 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 grundvandsressourcens 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 grundvandsdannelse 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 genereres 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 %).

17.3 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.

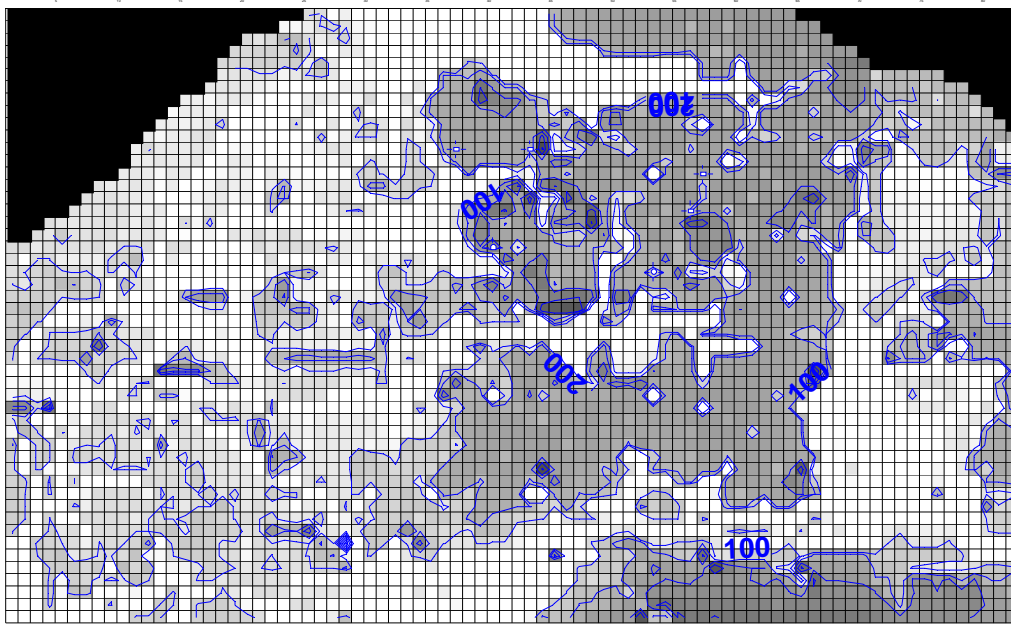
Tredimensionale grundvandsmodeller er i høj grad baseret på netop at beskrive grundvandets strømning i og mellem grundvandsførende lag. Modeloutput vil blandt andet være et arealdistribueret grundvandspotentialer for de enkelte lag. Afhængigt af hvor avanceret den enkelte model er, kan udstrømning til 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 boringer filtersat 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.

17.4 GRUNDEVANDSDANNELSE TIL ØVRE MAGASINER

Den arealdistribuerede grundvandsdannelse kan ikke kortlægges ved hjælp af simple metoder men forudsætter en grundvandsmodel incl. en god rodzonemodel (Henriksen et al., 2000). I figur 17.3 er vist et eksempel Esbjergmodellen.

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 17.3 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 $p=0.5$.

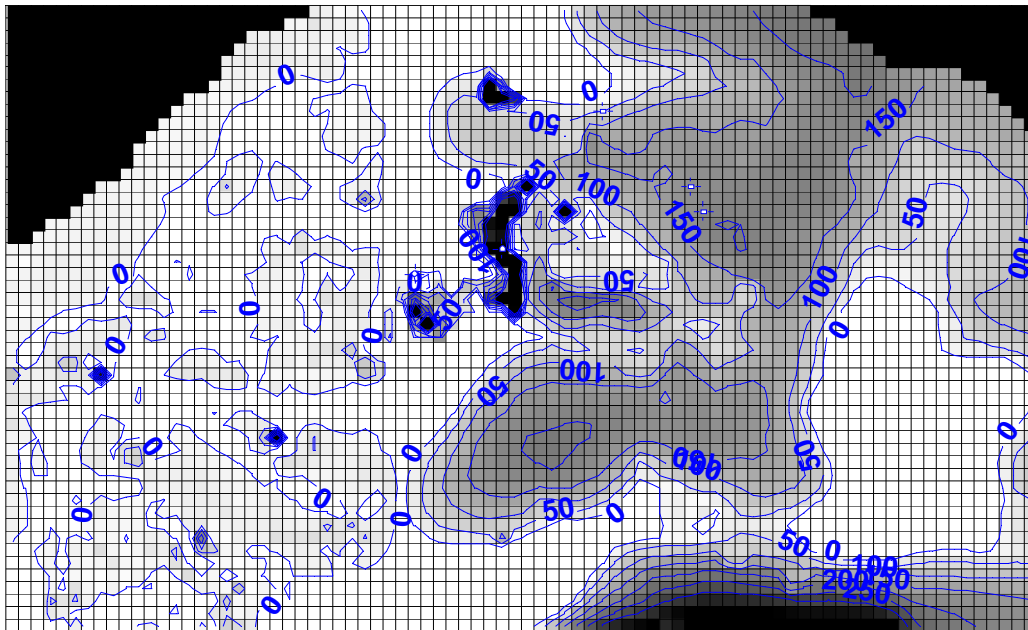


Figur 17.3 Eksempel på simulering af grundvandsdannelse til øvre grundvandsmagasin for Esbjergmodellen (grundvandsdannelse i mm/år). I det mørkegrå område er grundvandsdannelsen i størrelsesordenen 300-500 mm/år. I det hvide områder sker der ingen grundvandsdannelse til de øvre magasiner (udstrømningsområde). Figuren viser resultat for beregningslag nr. 4 svarende til kote -10 m.

17.5 GRUNDVANDSDANNELSE TIL DYBERE MAGASINER

I forhold til beskrivelsen i afsnit 17.4 så er den arealdistribuerede grundvandsdannelse til dybe magasiner langt mere afhængig af forskellige parameterværdier, konceptuel model end af inputværdier. I figur 17.4 er vist et eksempel for Esbjergmodellen der illustrere denne forskel (der er vist grundvandsdannelsen til et niveau der stort set svarer til Ribe Formationen).

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 tidslige variationer fra år til år, som et grundlag for arbejdet med indsatsplaner og design af monitoringssystemer for indsatsområder, se afsnit 17.8.



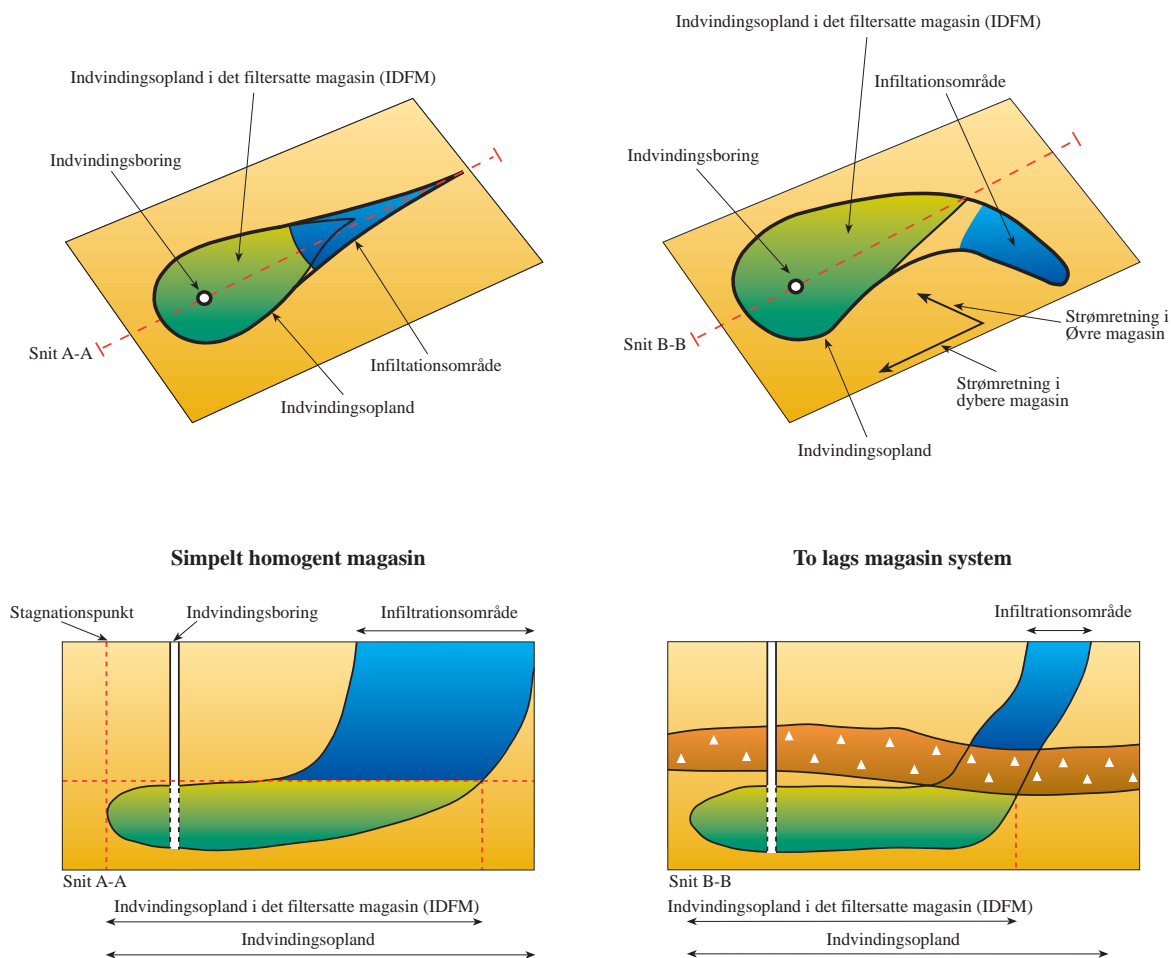
Figur 17.4 Eksempel på simuleret grundvandsdannelse til dybt magasin for Esbjergmodellen. Grundvandsdannelse i mm/år til lag 8 i modellen svarende til Ribe Formationen. I det centrale område er grundvandsdannelsen til Ribeformationen 100-200 mm/år. I et par enkelte områder midt i modelområdet og langs 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).

17.6 GRUNDEVANDSDANNENDE OPLANDE OG INDVINDINGSOPLANDE TIL MAGASINER OG/ELLER KILDEPLADSER/BORINGER

Med 3D partikelbanemodeller 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.

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 partikelbanemodeller "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 havne i borer eller en anden antagelse). Præsenter evt. betydning af sådanne valg.



Figur 17.5 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.

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 perspektiv, 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).

17.7 TRANSPORTTIDER OG OPHOLDSTIDER I FORSKELLIGE GRUNDEVANDSMILJØER

Transporttiden er en væsentlig størrelse i forbindelse med zonerings, 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 grundvandsmagasin.

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 .

17.8 FØLSOMHEDS- OG USIKKERHEDSANALYSER

En følsomhedsanalyse er en 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 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 simuleringens resultater.

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 inddragelse 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 15) 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 teknikker med strømningsmodel, partikelbanemodel og evt. stoftransportmodel. Herved kan de usikkerheder der vedrører hydrauliske parameterverdier indgå direkte i simuleringsscenerier (beregnete modeloutput).

Hvis der også skal sættes usikkerheder på betydningen af geologisk tolkning, lagfølger og modellens 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 inputverdier der svarer til fx 95 % konfidensgrænser for fx nettonedbøren, tal som evt. kan beregnes ved nærmere analyser af inddataværdier (nedbør, fordampning mm.). En anden mulighed er at rangordne output beregnet med forskellige inputverdier, parametre mm. og bestemme udvalgte fraktilværdier (udfra kummulativ fordelingsfunktion af fx beregnede grundvandsdannelser 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 kalibreringsresultater 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 parameterverdier.

Metode (3) består i at benytte fx invers modellering og/eller Monte Carlo metodik, til en systematisk analyse af modelresultater. Parameter- og inputverdier skal her gives en variationsramme (sandsynlighedsfordeling) og resultater returneres som en variationsramme (sandsynlighedsfordeling). 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- fordeling)
- 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 usikkerhederne. Man kan vælge at "post-konditionere" realisationerne, ved at teste hvert enkelt benyttende et eller 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 simuleringskørsel med disse parameterverdier. 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), komplementær fordelings funktion (1-p, på engelsk ccdf plot), eller sandsynligheds densitets funktion (på engelsk probability density function: pdf plot), se fx Ruskauff (1998).

17.9 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., Trolborg, 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/udgiv/publikationer/2000/87-7944-191-2/html/>

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 18 PARTIKELBANEMODELLERING OG ALDERSSIMULERING

Torben Obel Sonnenborg og Peter Engesgaard
Geologisk Institut, Københavns Universitet

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Indvindingsopland, infiltrationsområder, grundvandsdannende områder, partikelbanesimulering, MODPATH, MIKE SHE, aldersdatering, opholdstider, aldersfordelinger, stoftransportsimulering

ABSTRACT: I forbindelse med indsatskortlægningen er det ofte relevant at få bestemt bl.a. grundvandsdannende områder, indvindingsopland, og infiltrationsområder. I dette kapitel defineres disse begreber, og det hyppigst anvendte værktøj til bestemmelse af ovenstående områder, partikelbanesimulering, beskrives. To udvalgte partikelbanemodeller, MODPATH og MIKE SHE, præsenteres kort, og begrænsninger/muligheder ved anvendelsen af partikelbanemodeller beskrives. Alternative metoder til bestemmelse af grundvandets alder introduceres, og via eksempler illustreres, at man skal være påpasselig med at anvende målinger af miljøtracere såsom tritium, tritium-helium, eller CFC til datering af grundvandet. Der opfordres til at benytte stoftransportsimuleringer til støtte for kalibrering af grundvandsmodeller i tilfælde hvor der foreligger information omkring grundvandets alder eller koncentrationsmålinger af forskellige miljøtracere.

18.1 INDLEDNING

Formålet med opstilling af en grundvandsmodel er i mange tilfælde at opnå viden om strømningsveje og opholdstider i grundvandssystemet frem for modellens primære løsningsvariabel, som er det hydrauliske trykniveau. Baseret på trykniveaufordelingen er det imidlertid relativt enkelt at beregne den gennemsnitlige lineære strømningshastighed, v , som i en grundvandsmodel findes ved løsning af en diskretiseret udgave af følgende udtryk

$$v_i = \frac{q_i}{n_e} = -\frac{K_i}{n_e} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (18.1)$$

hvor q er Darcy-hastigheden, n_e er den effektive porøsitet, h er det hydrauliske trykniveau, og x_i er den rumlige koordinat i retning i ($i = x, y, z$). Det ses af (18.1), at ud over den hydrauliske ledningsevne, som allerede er specificeret ved grundvandsmodellens løsning af det hydrauliske trykniveau, kræver bestemmelsen af hastighedsfeltet også information om den effektive porøsitet. Den effektive porøsitet beskriver den fraktion af det porøse medium, igennem hvilket der foregår en advektiv strømning. Heldigvis er n_e i de fleste tilfælde forholdsvis velkendt, og det er derfor relativt uproblematisk at tilvejebringe dette input. En vigtig undtagelse fra denne regel optræder i forbindelse med dobbeltporøse medier som f.eks. opsprækket moræneler eller opsprækket kalk og kridt. Behandling af denne specielle problemstilling ligger udenfor rammerne for dette kapitel, og vil ikke blive berørt yderligere.

Hastighedsfeltet kan anvendes til at bestemme strømmlinier gennem grundvandssystemet, og en meget effektiv måde at gøre dette på er ved at anvende en partikelbanemodel. Partikelbanesimulering kan benyttes både til at visualisere strømningsfeltet og til at følge forurenende stoffers vej

gennem grundvandszonen. Desuden kan partikelbanesimulering anvendes til at bestemme grundvandsdannende områder, indvindingsoplande og infiltrationsområder.

Partikelbanesimulering kan også tilvejebringe information om gennemsnitlige transporttider til et givet punkt i grundvandssystemet. Hvis der foreligger målinger af grundvandet alder er det derfor muligt at udnytte partikelbanesimuleringer til kalibrering eller validering af grundvandsmodellen. Da de simulerede transporttider er stærkt afhængige af størrelsen og fordelingen af den hydrauliske ledningsevne, vil observationer af grundvandsalder potentielt kunne bidrage med vigtig information ved kalibrering af grundvandsmodellen.

Det er velkendt, at den geologiske heterogenitet er af afgørende betydning for spredningen af f.eks. forureningsstoffer i grundvandssystemet. Resultater fra en partikelbanemodel, der er baseret på homogene zoner af hydraulisk ledningsevne, skal derfor tolkes med forsigtighed. Zoneringsmetoden, hvor der foretages en horisontal opdeling af grundvandsmagasinet i en række zoner, er ofte tilstrækkelig, når der skal simuleres trykniveauer og gennemsnitlige vandflukse, men vil simulere strømninger, der forudser en relativ ensformig strømning i forhold til det virkelige system, hvor man kan forvente en højere grad af variabilitet i hydraulisk ledningsevne og dermed også hastighedsfeltet. I nogle områder vil der derfor foregå en hurtig strømning, mens der i andre områder vil være forholdsvis langsom strømning, og det er derfor forventeligt, at modellens resultater vil give en mindre spredning i f.eks. transporttider end der observeres i felten.

18.2 INFILTRATIONSOMRÅDER OG INDVINDINGSOPLANDE

Inden partikelbanesimuleringer beskrives, vil de problemstillinger, hvor partikelbanesimuleringer normalt anvendes, først blive beskrevet. I den forbindelse vil en række begreber og udtryk desuden blive defineret.

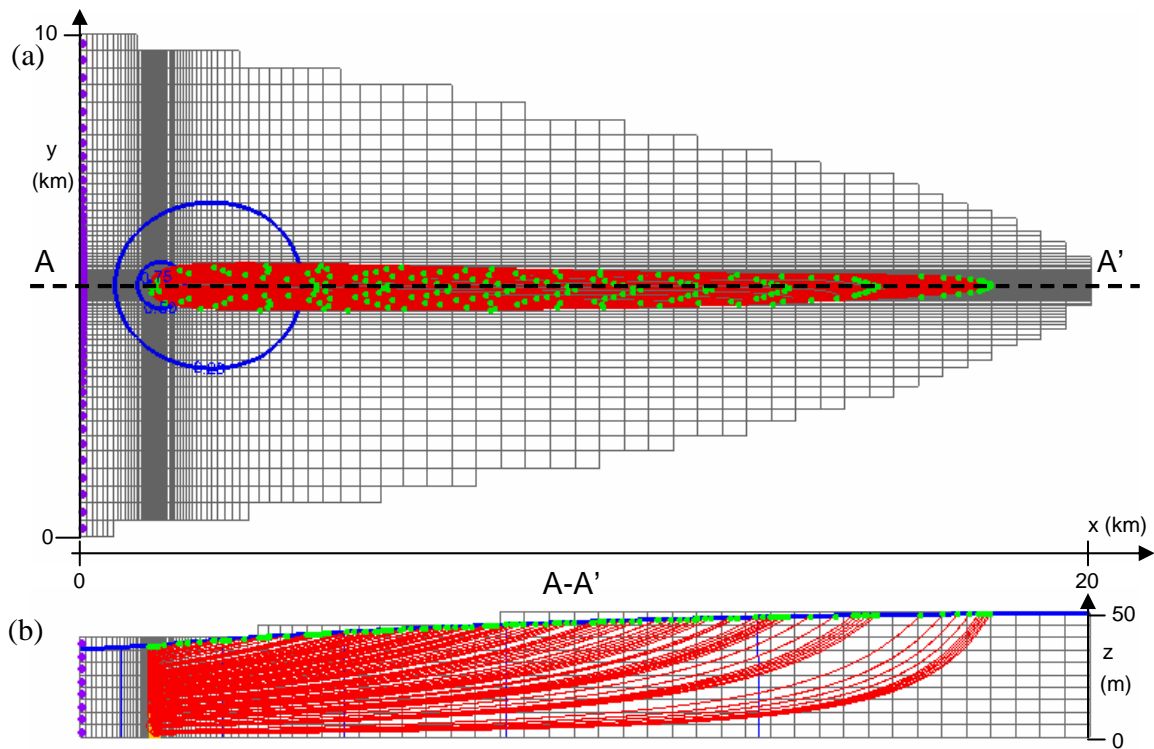
18.2.1 Infiltrationsområde

Det vand, der indvindes fra en grundvandsboring, strømmer ind til grundvandssystemet gennem et område med et vist areal. Under danske forhold vil indstrømningen normalt foregå ved infiltration af nedbør til grundvandsspejlet, men i nogle tilfælde kan andre typer af indstrømning finde sted, f.eks. indstrømning fra tilgrænsende magasin, indpumpning via boringer, udstrømning fra vandløb og søer, eller lækage fra eksempelvis vandforsyningsnettet. I det efterfølgende antages, at indstrømningen til grundvandssystemet sker ved infiltration af nedbør, og området, som udgør kilden til indvindingsboringen, definerer da det grundvandsdannende område til den pågældende indvindingsboring. Dette område er også beskrevet som det grundvandsdannende opland (Miljøstyrelsen, 2000) og senest som infiltrationsområdet (Henriksen et al., 2000; Henriksen, 2001). I det efterfølgende vil udtrykket infiltrationsområde blive anvendt. Den internationale litteratur anvender der ofte termer som "contributing area", "area contributing recharge to well" og "area contributing recharge" (Reilly & Pollock, 1993; Franke et al., 1998). Boringens infiltrationsområde udgøres af det areal på jordoverfladen, som afgrænser området, hvor vand, der infiltrerer ned til grundvandsspejlet strømmer videre til brønden og pumpes ud af systemet. Hvis der antages lodret strømning i den umættede zone, vil der være sammenfald mellem arealet på hhv. jordoverfladen og grundvandsspejlet, hvor infiltrerende vand når indvindingsboringen.

18.2.2 Påvirkningsområdet og grundvandsdannende områder

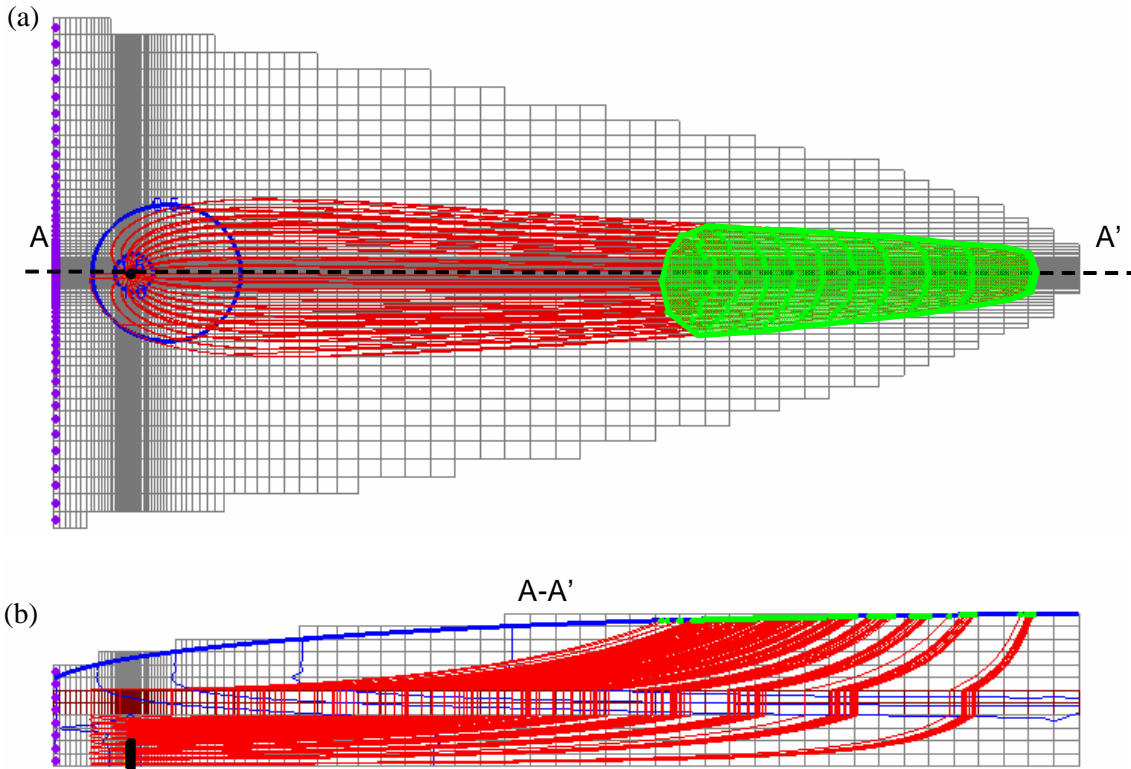
Infiltrationsområdet må ikke forveksles med påvirkningsområdet (eng.: "area of influence"), som i Miljøstyrelsen (1995) er defineret som det område, hvor en vandindvinding resulterer i en sænkning af grundvandsspejlet. Påvirkningsområdet kan også beskrives som den to-dimensionale projektion af sænkningstragten på jordoverfladen. På figur 18.1 er de forskellige termer illustreret for et frit magasin. Det betragtede område er 20 km langt og 10 km bredt ved nedstrøms rand i venstre side, hvor randbetingelsen udgøres af fastholdt trykniveau. Grundvandsdannelsen er specificeret til 0.4 mm/dag og den hydrauliske ledningsevne er i horisontal og vertikal retning sat til hhv. $K_h = 10^{-3}$ m/s og $K_v = 10^{-4}$ m/s. Der er indlagt en brønd 1500 m fra nedstrøms rand, som er filtersat i de nederste 10 m af magasinet. Der pumpes 5000 m³/dag fra brønden svarende til 10% af grundvands-

dannelsen. Der er anvendt en variabel diskretisering i horisontal retning, med relativt små celler omkring boringen (minimum 10 m), mens der i vertikal retning er anvendt en konstant lagtykkelse på 5 m. Sænkningen forårsaget af oppumpningen er illustreret med de blå konturlinier, som samtidig indikerer påvirkningsområdet. Der er vha. baglæns partikelbanesimulering med MODPATH bestemt hhv. indvindingsopland (se afsnit 18.2.4), som udgøres af det areal, som de røde strømlinier udspænder, og infiltrationsområde, der udgøres af det areal som de grønne endepunkter udspænder. Der ses at være sammenfald mellem infiltrationsområde og indvindingsopland for det illustrerede eksempel, mens det påvirkede område adskiller sig betydeligt herfra.



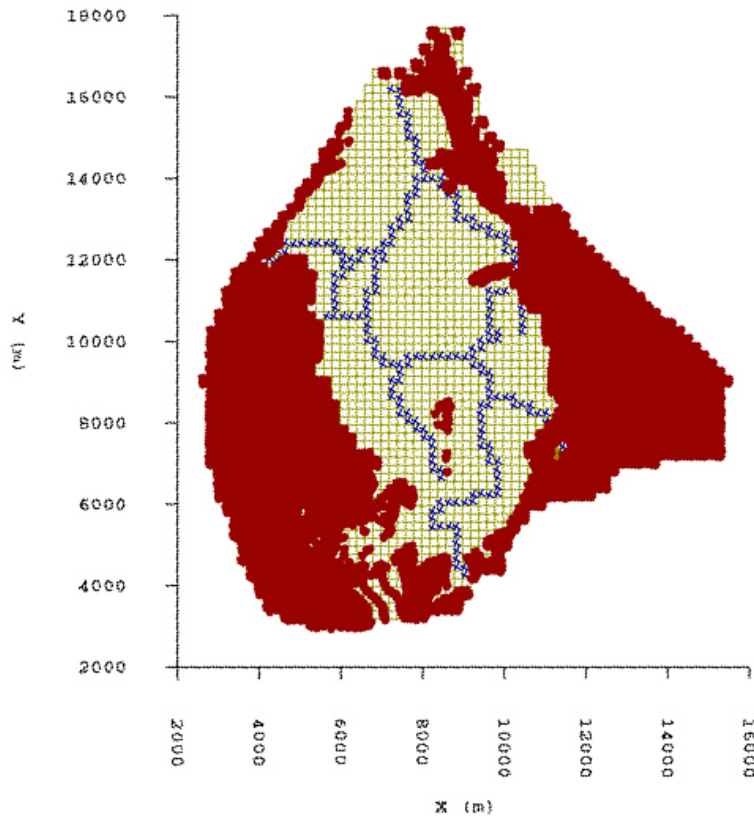
Figur 18.1 Illustration af indvindingsopland, infiltrationsområde og påvirkningsområde for et frit magasin. (a) Horisontalt snit gennem området. (b) Vertikalt snit midt gennem området vist øverst. De røde linier angiver strømlinier mellem grundvandspejlet og indvindingsboringen. De grønne symboler angiver, hvor partikler, der følges fra boringen mod strømningsretningen, ender. De blå konturer på det horisontale snit illustrerer sænkningstragten genereret af indvindingen, og indikerer dermed påvirkningsområdet.

På figur 18.2 ses en tilsvarende simulering for et system bestående af et øvre frit magasin som adskilles fra et nedre 20 m tykt magasin af et 10 m tykt lerlag med hydrauliske ledningsevner $K_h = 10^{-7}$ m/s og $K_v = 10^{-8}$ m/s. De øvrige forhold er som beskrevet for det frie magasin vist i figur 18.1. I dette tilfælde ligger infiltrationsområdet langt fra indvindingsboringen, og udgør kun en delmængde af indvindingsoplandet.



Figur 18.2 Illustration af indvindingsopland, infiltrationsområde og påvirkningsområde for et artesisk magasin. (a) Horisontalt snit gennem området. (b) Vertikalt snit midt gennem området vist øverst. De røde linier angiver strømninger mellem grundvandsspejlet og indvindingsboringen. De grønne symboler angiver, hvor partikler, der følges fra boringen mod strømningsretningen, ender. De blå konturer på de horisontale snit illustrerer sænkningstragten genereret af indvindingen, og indikerer dermed påvirkningsområdet. Det grønne område angiver infiltrationsområdet for boringen.

Infiltrationsområdet skal også adskilles fra det grundvandsdannende område for et grundvandsmagasin. Det grundvandsdannende område for et grundvandsmagasin omfatter hele det areal på jordoverfladen, hvor infiltrerende nedbør tilgår det pågældende grundvandsmagasin (Miljøstyrelsen, 2000). Det er derfor vigtigt at specificere, hvilket magasin der er tale om, når der tales om grundvandsdannende områder. Betragtes eksempelvis et opland med positiv nettonedbør, hvor grundvandsystemet består af et terrænnært frit magasin og et dybere artesisk magasin, vil det grundvandsdannende område for det frie magasin inkludere hele oplandet, da nedbøren vil infiltrere til magasinet i hele området. Kun søer og vandløb, hvor der er en opadrettet gradient fra det frie magasin, vil kunne betragtes som ikke hørende til det grundvandsdannende opland for magasinet. For det dybereliggende artesiske magasin, hvor der både findes områder med opad- og nedadrettet gradient, vil det grundvandsdannende område kun udgøre en delmængde af oplandets areal. På figur 18.3 ses et eksempel på kortlægning af de grundvandsdannende områder i et mindre opland, der er omgrænset af impermeable grænser. Grundvandet strømmer generelt i nordlig retning. De grundvandsdannende områder til et regionalt artesisk magasin, som overlejres af hhv. moræneler og et øvre, frit magasin, er primært placeret i periferien af oplandet, mens der i den centrale del af oplandet er opadrettet gradient, og dermed vil infiltrerende grundvand i denne del af oplandet ikke nå ned til det regionale nedre magasin.



Figur 18.3 Kortlægning af grundvandsdannende områder til artesiske magasiner. De blå x-symboler angiver placeringen af vandløb i oplandet. De røde arealer angiver områder, hvor vand, der infiltrerer til grundvandsspejlet, strømmer ned til det artesiske grundvandsmagasin.

18.2.3 Karakterisering af infiltrationsområdet

Mængden af vand, der indvindes fra brønden, skal modsvares af en tilsvarende grundvandsdannelse indenfor infiltrationsområdet. Dette kan under forudsætning om stationaritet formuleres som

$$Q = \int_{A_{inf}} R(A) dA \tag{18.2}$$

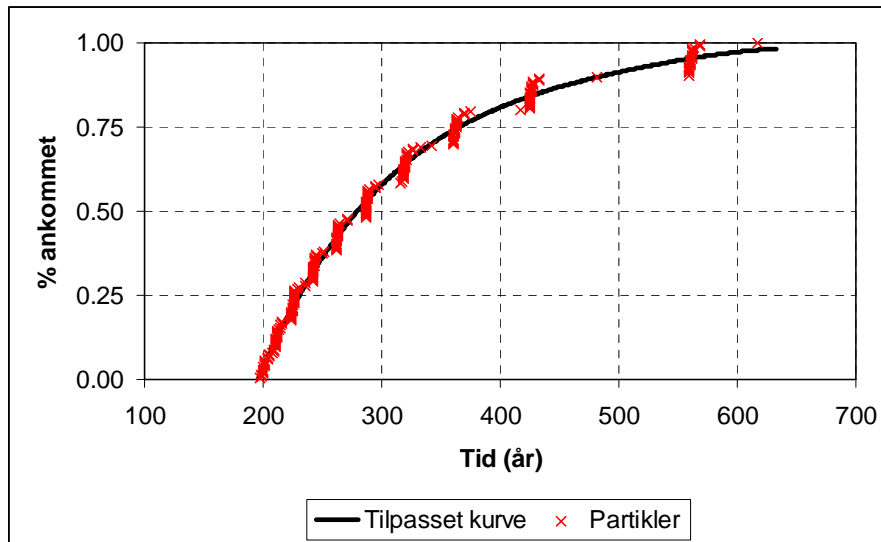
hvor Q er oppumpningsraten [m^3/s], $R(A)$ er grundvandsdannelsens størrelse som funktion af stedet [m/s], A er arealet [m^2], og A_{inf} er arealet af infiltrationsområdet [m^2]. I tilfælde med ensformig grundvandsdannelse kan (18.2) simplificeres til

$$Q = RA_{inf} \tag{18.3}$$

Generelt vil grundvandsdannelsen variere som funktion af stedet. Dette skyldes dels variationer i nettonedbøren og heterogene hydrogeologiske karakteristika, men det kan også skyldes tilstedeværelsen af dræn. Dræne vil transportere en del af den nedbør, der infiltrerer til grundvandsspejlet væk fra grundvandssystemet, og denne del vil dermed ikke kunne bidrage som kilde til en indvindingsboring. I nogle infiltrationsområder vil man både finde arealer med og uden drænafstrømning, og de områder, hvor der genereres drænafstrømning, kan fordelingen mellem drænafstrømning og infiltration til de dybereliggende dele af magasinerne afhængige af årstiden og dermed være en funktion af tiden. Den arealdistribuerede grundvandsdannelse og tilstedeværelsen af dræn kan tilsammen gøre det vanskeligt at opstille en simpel vandbalance af typen (18.3). Hertil kræves en detaljeret numerisk analyse, som det kan være vanskeligt at udføre nøjagtigt i praksis.

Af (18.2) ses, at lave grundvandsdannelser resulterer i store infiltrationsområder og omvendt. Tilsvarende vil høje indvindingsrater resultere i store infiltrationsområder. Placeringen af infiltrationsområdet for en indvindingsboring vil afhænge stærkt af heterogeniteten af de geologiske enheder, som vandet gennemstrømmer fra kilden til boringen. For at afgrænse infiltrationsområdet er det nødvendigt at kortlægge strømlinierne, der forbinder grundvandsspejlet og boringens filter, hvilket relativt let gøres vha. partikelbanesimuleringer.

Partikelbanesimuleringer muliggør også en analyse af transporttiden fra infiltrationsområdet til indvindingsboringen. På figur 18.4 ses et eksempel på fordelingen af transporttiden fra grundvandsspejlet til indvindingsboringen i det artesiske magasin illustreret i figur 18.2.



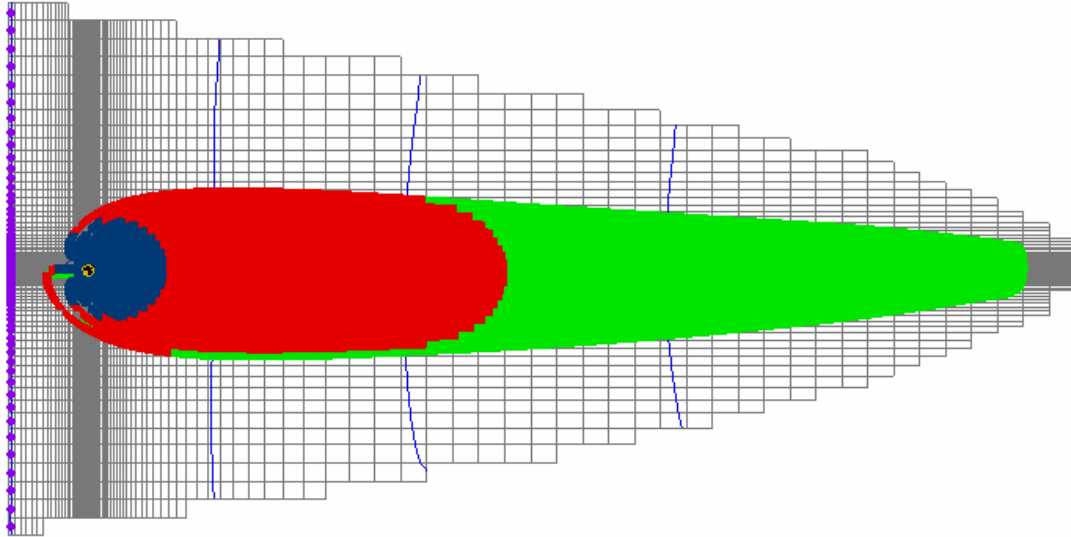
Figur 18.4 Opholdstidsfordelingen for vand der indvindes fra det artesiske magasin vist på figur 18.2. Vha. den tilpassede kurve findes, at 50% af partiklerne ankommer til boringen indenfor 280 år.

18.2.4 Indvindingsopland

Fra det infiltrerende vand når grundvandsspejlet og til det ender i boringens filter, vil det strømme gennem et volumen af grundvandssystemet, der betegnes indvindingsoplandet (Miljøstyrelsen, 1995). På engelsk anvendes udtrykket "capture zone" når der er tale om oprensning af forurening, mens der oftest benyttes termen "well head protection zone", når der er tale om beskyttelse af vandkvaliteten i forbindelse med grundvandsindvinding til vandforsyning. Indvindingsoplandet er defineret af de strømlinier, som markerer grænsen mellem vand der indfanges af indvindingsboringen og vand der ikke indfanges. Indvindingsoplandet er et tre-dimensionalt legeme indenfor hvilket alle vandmolekyler før eller siden havner i boringen. Indvindingsoplandets form vil i høj grad afhænge af potentialeforholdene i grundvandssystemet, da strømmingen ind mod boringen er styret af gradientforholdene i magasinet. For simple problemstillinger, hvor kun magasinet, der indvindes fra, betragtes, kan der findes analytiske løsninger til afgrænsning af indvindingsoplandet (Miljøstyrelsen, 1995). Da der herved kun findes en delmængde af det totale indvindingsopland, er de analytiske løsninger ofte af begrænset værdi. Generelt er det nødvendigt at opstille en tre-dimensionel strømnings- og partikelbanemodel, hvis der skal opnås realistiske estimater for det totale indvindingsopland.

Hvis grundvandsspejlet før indvinding er totalt fladt, vil indvindingsoplandet være cirkulært omkring boringen og være sammenfaldende med sænkningstragten. I realistiske situationer med hældende vandspejl vil indvindingsoplandet udgøre et aflangt område, der strækker sig fra lidt nedstrøms for boringen til den fjerneste ende af infiltrationsområdet i opstrøms retning, se figur 18.1 og 18.2.

Indvindingsoplande kan beskrives som funktion af tiden, f.eks. ét-års indvindingsopland eller 10-års indvindingsopland. Vandet i volumenet omsluttet af det tidsspecifikke indvindingsopland vil blive udskiftet indenfor det specificerede tidsrum. På figur 18.5 ses et eksempel på indvindingsoplande bestemt til forskellige tidspunkter for det artesiske magasin præsenteret i figur 18.2.



Figur 18.5 Indvindingsoplande til tiderne 10 år (blå), 100 år (rød) og 1000 år (grøn) for eksemplet vist i figur 18.2.

18.3 BEREGNING AF PARTIKELBANER

Den styrende ligning for advektiv transport af et konservativt stof er i tre dimensioner givet ved

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad (18.4)$$

hvor c er koncentrationen af det opløste stof [kg/m^3]. Den totale afledede af koncentrationen mht. tiden er givet ved

$$\frac{dc(x(t), y(t), z(t), t)}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{dx(t)}{dt} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{dy(t)}{dt} + \frac{\partial c}{\partial z} \frac{dz(t)}{dt} \quad (18.5)$$

hvor

$$\frac{dx(t)}{dt} = v_x \quad , \quad \frac{dy(t)}{dt} = v_y \quad , \quad \frac{dz(t)}{dt} = v_z \quad (18.6)$$

Ligning (18.6) er en første ordens ordinær differentiaalligning, der har løsninger af typen

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t v_x(x, y, z, t) dt \quad (18.7)$$

Tilsvarende ligninger kan opskrives i y - og z -retningen. Ligning (18.7) udtrykker, at positionen af en vandpartikel til tiden t , $x(t)$, kan findes som vandpartiklens position ved start, $x(t_0)$, hvortil der adderes den integrerede effekt af ændringer i v_x langs strømlinien. Hvis strømningshastigheden v er givet ved en analytisk løsning, kan dette integrale bestemmes analytisk. I mere komplicerede tilfælde er det nødvendigt at anvende numeriske integrationsmetoder, som beskrives kort nedenfor.

Partikelbanekoder kan generelt karakteriseres efter dels hvilken metode der benyttes til at interpolere hastigheder, som på basis af grundvandsløsningen kun er tilgængelig i diskrete punkter, og dels hvilken metode der benyttes til at flytte partiklerne.

18.3.1 Hastighedsinterpolation

Oftest benyttes lineær eller bilineær interpolation til at finde hastigheden i et vilkårligt punkt i modelområdet. Den lineære metode er den mest simple og kan for f.eks. hastigheden i x-retningen formuleres som

$$v_x = (1 - f_x)v_{x(i-1/2,j)} + f_x v_{x(i+1/2,j)} \quad (18.8)$$

hvor $v_{x(i-1/2,j)}$ er hastigheden i x-retningen i punktet $(i-1/2,j)$, dvs. på grænsen mellem celle $(i-1,j)$ og (i,j) , og f_x er en lineær vægtningsfunktion givet ved

$$f_x = \frac{x_p - x_{i-1/2,j}}{\Delta x_{i,j}} \quad (18.9)$$

hvor x_p er partiklens x-koordinat og $\Delta x_{i,j}$ er cellestørrelsen i x-retningen. Det ses af (18.8) at den lineære interpolation kun tager hastighedsvariationen i x-retningen i betragtning. I bilineær interpolation udnyttes også hastighedsvariationen i de andre retninger. I to dimensioner kan metoden formuleres som

$$v_x = (1 - F_y) \left[(1 - f_x)v_{x(i-1/2,j-1)} + f_x v_{x(i+1/2,j-1)} \right] + F_y \left[(1 - f_x)v_{x(i-1/2,j)} + f_x v_{x(i+1/2,j)} \right] \quad (18.10)$$

hvor

$$F_y = \frac{y_p - y_{i,j-1}}{\Delta y_{i,j-1/2}} \quad (18.11)$$

Den lineære interpolationsmetode giver kontinuerte hastigheder langs den respektive koordinat, f.eks. x-koordinaten, men resulterer i diskontinuerte hastigheder i de andre retninger. Bilineær (eller trilineær i tre dimensioner) interpolation resulterer i kontinuerte hastigheder i alle retninger, hvilket for homogene reservoirer generelt resulterer i mere nøjagtige bestemmelser af hastighederne. Til gengæld genskabes diskontinuerte hastigheder ved grænsen mellem to geologiske enheder med forskellig hydraulisk ledningsevne ikke. Dette kan være et problem, hvis der benyttes en grov diskretisering. Den lineære interpolationsmetode kræver desuden mindre regnearbejde og er derfor hurtigere at anvende. Den simple lineære algoritme foretrækkes af ovenstående grunde normalt frem for de mere avancerede interpolationsmetoder (Zheng & Bennett, 2002).

18.3.2 Algoritmer til flytning af partikler

Partikler følges langs strømlinier ved at løse (18.6). Løsningsmetoderne kan generelt opdeles i analytiske (eller semianalytiske) og numeriske. Den semianalytiske metode, der kun kan benyttes i sammenhæng med lineær interpolation af hastighederne, kan gengives som (Pollack, 1988)

$$x(t_2) = x_1 + \frac{1}{A_x} \left[v_x(t_1) \exp(A_x \Delta t) - v_{x1} \right] \quad (18.12)$$

hvor $v_x(t_1)$ er hastighedskomponenten i x-retningen i punktet, hvor partiklen befinder sig til tiden t_1 og A_x er givet ved

$$A_x = \frac{v_{x2} - v_{x1}}{\Delta x} \quad (18.13)$$

og de øvrige symboler er defineret i figur 18.6. Ligning (18.12) er kun gældende for konstante værdier af A_x . Derfor må tidskridtet Δt vælges således, at partiklen ikke krydser en cellegrænse

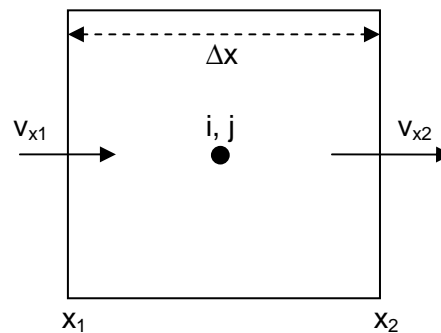
indenfor det pågældende tidsskridt. Den semianalytiske metode giver generelt nøjagtige og hurtige resultater.

De numeriske metoder kan illustreres vha. den Eulerske metode, hvor løsningen til (18.6) kan formuleres som

$$x_{n+1} = x_n + v_x(x_n, y_n, z_n) \Delta t \quad (18.14)$$

hvor x_{n+1} er partikelplaceringen (i x-retningen) til det nye tidsskridt, mens x_n er partikelplaceringen til det gamle tidsskridt. v_x er hastigheden i x-retningen og Δt er tidsskridtet.

Eulers metode har tendens til at give store numeriske fejl med mindre der benyttes små tidsskridt. Til gengæld er metoden let at implementere i en kode og den kan benyttes med enhver hastighedsinterpolationsalgoritme. Nøjagtigheden af de numeriske metoder kan forbedres betragteligt ved at benytte en af de højereordens skemaer som f.eks. Runge-Kutta metoden. Denne metode er ikke plaget af numeriske fejl i samme grad, men kræver til gengæld et væsentligt større beregningsarbejde. Der refereres til Zheng & Bennett (2002) for en mere detaljeret beskrivelse af de forskellige metoder.



Figur 18.6 Illustration af blok-centreret finite-difference celle med angivelse af hastigheder i x-retningen.

18.4 PARTIKELBANEMODELLER

Grundvandsmodellering foretages i Danmark hovedsageligt med MODFLOW og MIKE SHE, og partikelbanesimuleringer udføres derfor oftest med de tilhørende partikelbanekoder MODPATH og MIKE SHE partikelbanemodul. I det efterfølgende gives en kort beskrivelse af de to modeller.

18.4.1 MIKE SHE partikelbanemodul

MIKE SHE partikelbanemodul (DHI, 2000) er en del af det vandkvalitetssystem (MIKE SHE WQ), der hører til modellen. Partikelbanemodul kan anvendes til afgrænsning af infiltrationsområder og indvindingsoplande til indvindingsboringer eller grundvandsmagasiner.

For hvert beregningslag i modellen kan oplande til vandindvindinger bestemmes med modellen, således at såvel det samlede indvindingsopland og infiltrationsområdet kan bestemmes. Systemet holder styr på antallet af partikler, der indgår i en simulering, deres oprindelseskoordinater såvel som hvilke partikler, der havner i indvindingsboringerne.

MIKE SHEs partikelbanemodul foretager en beregning, som er analog til advektions-dispersionsligningen, idet der anvendes en random walk metode, hvor den advektive transport approksimeres vha. partikelbaneteknikken, og effekten af dispersion inkorporeres i løsningen ved at tilføje en tilfældigt forskydning af hver partikel efter at de er blevet flyttet advektivt. Størrelsen af den tilfældige forskydning afhænger af størrelsen af hastighedskomponenterne, dispersiviteterne og udfaldet fra en generator af tilfældige tal. Dispersions-delen kan slås fra, så der opnås en ren advektiv løsning. Der anvendes lineær interpolation af hastighedskomponenterne, og den advektive del af løsningen findes vha. den Eulerske metode (se afsnit 18.3.2). Hver partikel har en partikelmasse tilknyttet, hvilket kan udnyttes til beregning af en koncentration indenfor hver numerisk celle.

Forud for afvikling af partikelbanemodul skal der foreligge en strømningssløsning, som beregnes ved hjælp af MIKE SHEs grundvandsmodel (MIKE SHE WM). Partikelbanemodul kan foretage simuleringer på grundlag af enten stationær eller dynamisk strømningssimulering for grundvandskomponenten (SZ). Der kan kun udføres forward simulering, hvor partiklerne følges i strømningssretningen.

18.4.2 MODPATH partikelbanemodul

Partikelbanemodul MODPATH (Pollack, 1994) som tilhører MODFLOW systemet kan opstilles for enten stationær eller dynamisk strømning. Modulen beregner partikelbaner på baggrund af hastighedsvektoren for ethvert punkt i strømningsfeltet, baseret på flow rater mellem de enkelte beregningsknudepunkter fra strømningsmodellen.

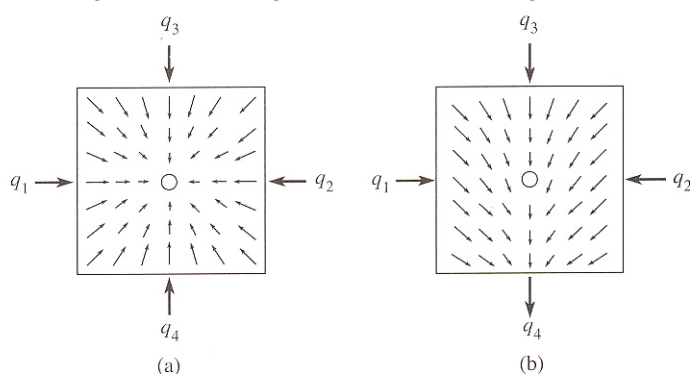
Der benyttes lineær interpolation til at beregne hastighedskomponenterne for punkter inden for hvert enkelt modelgrid. Partiklerne flyttes vha. den semianalytiske metode, og der genereres derfor resultater med et begrænset beregningsarbejde og god nøjagtighed til følge. Da der ikke benyttes en random walk metode er der i MODPATH tale om en ren advektiv partikeltransport (uden dispersion). På grund af denne relativt simple løsning er det muligt at beregne partikelbaner i både nedstrøms og opstrøms retning. Vha. opstrøms optionen er det relativt let at bestemme tidsafhængige indvindingsoplande til indvindingsboringer. Desuden kan programmet anvendes til bestemmelse af infiltrationsområder og opholdstider.

18.4.3 Begrænsninger ved numeriske modeller

Såvel MIKE SHE som MODPATH har forskellige begrænsninger som forudsættes forstået bl.a. (1) tilgrundliggende antagelse i partikelbanesimuleringen, (2) diskretiseringseffekter og (3) usikkerheder i parametre og randbetingelser.

Nøjagtigheden af de numerisk beregnede partikelbaner og en korrekt fortolkningen af simuleringsresultatet afhænger af, i hvilken grad grundvandssystemet realistisk set kan repræsenteres af et diskret knudepunktsnet af finite differens gridceller. Graden af rumlig diskretisering i en finite differens model har indflydelse på (a) detaljeringsniveauet ved hvilken det hydrogeologiske system og randbetingelser til dette kan repræsenteres, (b) nøjagtigheden af beregningen af strømningshastighed, som bl.a. afhænger af konvergenskriterierne, der specificeres til strømningsløsningen, og (c) evnen til så præcist som muligt at repræsentere interne 'sinks' (dvs. f.eks. indvindingsboringer). Ofte, vil en detaljeringsgrad, som er tilstrækkelig for en strømningsmodellering af grundvandsressourcen, ikke være tilstrækkelig detaljeret for en korrekt partikelbaneanalyse. Tidsdiskretiseringen kan ligeledes være en væsentlig fejlkilde i partikelbanesimuleringer.

Den rumlige diskretisering har stor betydning for repræsentationen af vandindvindinger i forbindelse med partikelbanesimuleringer. Problemet er knyttet til simulering af partikelflytninger i gridceller, som udgør et 'svagt' drænled (eng.: "weak sink"), se figur 18.7.



Figur 18.7 Illustration af (a) stærkt drænled, hvor alle hastighedsvektorer peger ind mod cellen, og (b) svagt drænled, hvor hastighedsvektorerne peger ud af cellen på en eller flere af cellens sider. Fra Zheng & Bennett (2002).

Et stærkt dræn (eng.: "strong sink") ses til venstre, hvor der fjernes en tilstrækkelig mængde vand fra cellen til, at vandet strømmer ind til cellen gennem alle cellens sider. Et svagt drænled er karakteriseret ved, at selvom der fjernes vand fra cellen, vil der alligevel være en udstrømning fra mindst én af cellens sider. Disse celler kan indeholde bl.a. oppumpninger og vandløb, hvor oppumpningsraten/udstrømningen til boring/vandløb ikke er stor nok til, at de kan forbruge alt det vand, der strømmer ind til griddet. Nettoresultatet er en celle med et drænled (eng.: "sink grid cell"), som har

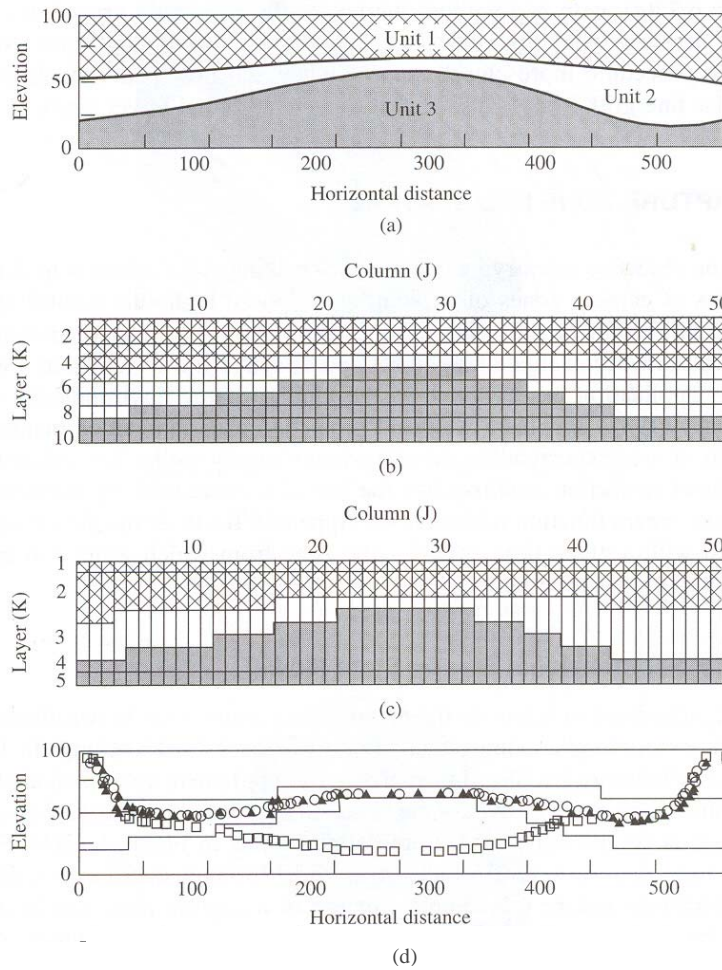
udstrømning gennem en eller flere af cellens sider til trods for at der fjernes vand fra cellen. For sådanne celler er det ikke muligt for partikelbanesimulatoren at afgøre, hvorvidt partikler, der strømmer til cellen skal havne i indvindingsboringen/vandløbet eller strømme ud af/igennem cellen. Derfor er det nødvendigt på forhånd at specificere, om partikler, der strømmer til en celle med et svagt drænled, skal stoppe i cellen eller passere igennem cellen. Nogle koder, f.eks. MODPATH, giver mulighed for at angive, at partiklerne skal stoppe i cellen, hvis mængden af vand, der fjernes, er større end en vis procentdel af den totale indstrømning til cellen (Pollack, 1994). Valget vil influere på f.eks. størrelsen af infiltrationsområdet, der i tilfælde af, at partikler tillades at passere gennem celler med svage drænled, vil have et større (eller samme) areal sammenlignet med en bestemmelse, hvor partiklerne stoppes i svage drænceller. Det konservative eller forsigtige valg vil derfor være at lade partiklerne passere gennem de svage dræn.

Problemet med svage drænled er direkte forbundet med grov rumlig diskretisering. Ved anvendelse af et finere beregningsnet kan problemet reduceres, idet svage drænled herved kan ændres til stærke drænled, hvor hele vandstrømningen til cellen ender i f.eks. indvindingsboringen.

Et andet tilfælde, hvor grov rumlig diskretisering kan resultere i problemer for partikelbaneløsningen, opstår i forbindelse med numerisk repræsentation af geologiske lag, hvis laggrænser varierer meget som funktion af stedet. På figur 18.8 ses et eksempel på et aquifersystem med irregulære geologiske enheder, som opløses numerisk ved at benytte enten en forholdsvis fin vertikal diskretisering med ækvidistant cellehøjde eller en diskretisering, hvor tykkelsen af de numeriske lag varierer på samme måde som de geologiske lags mægtighed. De tre hydrogeologiske enheder har en kontrast i hydraulisk ledningsevne på 1:100:10. Enhed 2, det midterste lag, er med andre ord laget med størst permeabilitet.

Der antages at være no-flow randbetingelser på alle sider af det viste system. Der er placeret en kilde nær det øvre venstre hjørne og et dræn på samme størrelse i øverste højre hjørne. En enkelt partikel frigives fra midten af øverste venstre celle, og følges gennem de to modeller vha. en numerisk metode (Runge-Kutta). De to modeller giver meget forskellige resultater, se figur 18.8d, men det er resultaterne fra simuleringen med ækvidistant cellehøjde, der giver det korrekte resultat. Den korrekte transporttid findes til 948 dage, men i opsætningen med varierende cellehøjder simuleres en transporttid på 3955 dage. Eksemplet viser, at en uhensigtsmæssig diskretisering kan resultere i partikelbaneresultater, der ligger endog meget langt fra de sande værdier.

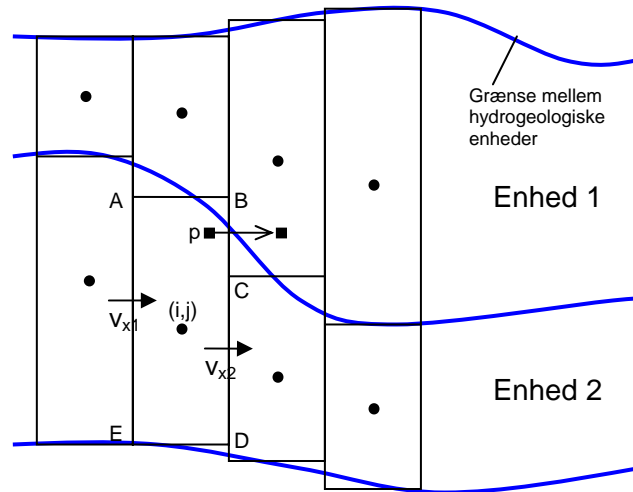
Der kan være flere årsager til, at ovenstående problem opstår. Dels kan der være problemer med strømningsløsningen, dels kan der opstå problemer specifikt relateret til partikelbaneløsningen, når der anvendes varierende cellehøjder. Hvis naboceller i et numerisk lag har væsentlig forskellig højde, kan løsningen af strømningsløsningen være fejlbehæftet, hvilket er et resultat af to bidrag. Det ene bidrag skyldes det relativt grove grid, som er en uundgåelig konsekvens af at repræsentere en hydrogeologisk enhed med et enkelt numerisk lag, og som resulterer i en relativ stor trunkeringsfejl. Det andet bidrag skyldes, at anvendelsen af stærkt varierende cellehøjder ikke er i overensstemmelse med den underliggende finite-difference teori (Zheng, 1994).



Figur 18.8 Eksempel på betydningen af forskellige metoder til diskretisering i vertikal retning på simuleringen af partikelbaner. (a) Vertikalt snit gennem aquifer-system, (b) fin vertikal diskretisering med ækvidistant cellehøjde, (c) grov vertikal diskretisering hvor cellehøjden følger lagtykkelsen, (d) beregnede partikelbaner for hhv. (b) □ og (c) ○. Beregningen angivet med ▲ er fundet vha. en korrektion af standardløsningen, se Zheng (1994).

Men selv hvis nøjagtigheden af strømningsløsningen antages at være tilfredsstillende, kan den varierende lagtykkelse give anledning til fejl i partikelbaneløsningen. Problemet kan illustreres vha. figur 18.9. Figuren viser et vertikalt snit gennem et system med to hydrogeologiske enheder, som hver repræsenteres af et numerisk lag. I det følgende betragtes strømningen fra cellen med knudepunktet (i,j). Der antages at være en strømning fra venstre mod højre. Strømningsløsningen resulterer i en fluks over grænsen C-D, men ikke over grænsen B-C, hvilket er i overensstemmelse med den korrekte løsning for strømning i det nederste modellag. Den horisontale strømningshastighed i punktet p, v_p , vil med en lineær interpolation blive beregnet ud fra hastighederne v_{x1} og v_{x2} , som er fundet ud fra de beregnede flukse, og som antages at repræsentere de korrekte strømningshastigheder mellem cellerne i det nederste modellag. Hvis der anvendes et tidskridt Δt , som resulterer i at partiklen i punktet p bevæger sig en afstand $v_p \Delta t$, som er større end afstanden mellem punktet p og planen B-C, vil partiklen strømme ind i en celle, der repræsenterer den øverste hydrogeologiske enhed. Partiklen er derved fejlagtigt blevet flyttet ind over grænsen til det overliggende lag, selv om partikelbaneløsningen er baseret på en strømningsløsning som er korrekt.

Mekanismen beskrevet ovenfor kan resultere i fejlagtige partikelbaneresultater som vist på figur 18.8. Zheng (1994) beskriver en metode til afhjælpning af problemet, men i det generelle tilfælde kan problemet kun minimeres ved at undgå for store overlap mellem celler fra forskellige model-lag. Desuden kan man være opmærksom på problemet og analysere de beregnede partikelbaneresultater med forsigtighed.



Figur 18.9 Illustration af system med varierende cellehøjde (efter Zheng, 1994).

18.4.4 Diskussion af partikelbanesimuleringer

Beskyttelse af indvindingsoplande og infiltrationsområder til vandindvindinger er problematisk, fordi strømlinier i et grundvandssystem ændrer sig som følge af ændringer i vandindvinding og nettonedbør, ligesom de hydrauliske egenskaber af heterogene grundvandssystemer ikke kan observeres direkte. Ud fra hypotetiske modeleksperimenter, med henblik på en nærmere forståelse af relationer mellem borer og infiltrationsområder, vurderes især variabiliteten af grundvandssystemet at have central betydning. Denne må derfor tages i betragtning i forbindelse med afgrænsning af infiltrationsområder ved hjælp af 3D-partikelbane-simuleringer (Reilly og Pollock, 1993).

Beskyttelsesstrategier som er rettet mod en beskyttelse af infiltrationsområder til indvindinger og som er baseret på en oversimplificering af grundvandssystemet, er nytteløse, idet man risikerer at beskytte områder, som ikke bidrager til indvindingen ved en boring, i stedet for en beskyttelse af de arealer der bidrager til boringen (Reilly og Pollock, 1993).

På trods af at Reilly og Pollocks analyser er baseret på forholdsvis simple magasinforhold (alluviale sandaflejringer), viser resultaterne at randbetingelser, oppumpningsrate og filtersat interval er nøglefaktorer. Resultatet af simuleringer for fire forskellige eksempler viser således, at infiltrationsområdet til en enkelt boring ikke nødvendigvis består af et sammenhængende område, og heller ikke nødvendigvis er placeret i nærheden af borerne. Selv for det relativt simple magasinssystem, som blev analyseret, var simulerede partikelbaner til en boring meget følsomme overfor randbetingelser og hydrauliske parametre for det 3-dimensionale system (Reilly og Pollock, 1993).

Strømning i grundvandssystemet afspejler alle de påvirkninger, som er påtvunget systemet. Partikelbaner ændrer sig som følge af nye påvirkninger på systemet, selv om disse påtvinges på andre lokaliteter end omkring den boring, som har interesse. Enhver beregning, som har til formål at bestemme infiltrationsområder, må vurdere partikelbaner for hele systemet i stedet for at analysere infiltrationsområdet til en enkelt boring. Så snart der tilføjes ændrede indvindingsforhold må vurde-

ringen af infiltrationsområder og indvindingsoplande derfor evalueres på ny (Reilly og Pollock, 1993).

Når infiltrationsområder og indvindingsoplande til indvindingsboringer skal kortlægges er det hensigtsmæssigt at anvende opstrøms partikelbanesimulering, hvor der placeres et antal partikler ved boringen og disse partikler følges i opstrøms retning. Denne type simulering kan give information om den fysiske afgrænsning af hhv. infiltrationsområde og indvindingsopland, og metoden kan også anvendes til at kvantificere, hvor langt partiklerne strømmer indenfor et givet tidsrum (se figur 18.5). Det er imidlertid farligt at udnytte opstrøms partikelbanesimulering til kvantificering af f.eks. opholdstidsfordeling inkl. middellopholdstider. Dette skyldes, at partiklerne, der placeres typisk symmetrisk omkring indvindingsboringen, ikke repræsenterer den fluks, som strømmer ind til boringen. Fluksen til boringen vil normalt ikke være symmetrisk fordelt, og ved at midle partiklernes transporttider vil der derfor begås en fejl. Det vil være mere korrekt, at udføre en forlæns partikelbanesimulering, hvor der placeres et antal partikler i hver numerisk celle ved grundvandspejlet, og partiklernes transporttider til indvindingen benyttes til at beregne opholdstidsfordeling. Men også i dette tilfælde skal man være påpasselig. F.eks. vil denne fremgangsmåde ikke være tilfredsstillende for eksemplerne illustreret i figur 18.1 og 18.2, da der her er benyttet en variabel diskretisering i horisontal retning. Hvis der frigives det samme antal partikler fra både små og store celler, vil partiklerne fra de små celler komme til at vægte mere end fluksen fra den pågældende celle berettiger. Der kan ligeledes opstå problemer, hvis der er forefindes dræn i infiltrationsområdet, da en del af grundvandsdannelsen da vil strømme til dræne og ikke til indvindingsboringen.

18.5 GRUNDEVANDSALDER OG OPHOLDSTIDSFORDELINGER

Brugen af aldersdatering til støtte for fortolkning af grundvandsanalyser, geologi, strømnings- og transportprocesser og modelkalibrering er efterhånden et udstrakt anvendt værktøj i Danmark (GEUS, 2004; Troldborg, 2004; Engesgaard et al., 2004; Hinsby et al., 2001, Engesgaard og Molson, 1998, Engesgaard et al., 1996).

I en modelkalibreringsfase kan målinger af koncentrationen af miljøtracere såsom CFC, tritium, og tritium-helium være afgørende for at kunne vælge mellem forskellige alternative modeller, hvad enten det er konceptuelle geologiske modeller (Troldborg, 2004) eller forskellige kombinationsmuligheder af hydrauliske parametre, der hver giver et tilfredsstillende kalibreringsresultat (Engesgaard et al., 1996). Ofte giver kalibreringen ikke et unikt resultat når der udelukkende benyttes hydrauliske trykniveauer. Regionale tracere har derfor tilføjet en ekstra datatype til kalibreringsprocessen.

Det er dog spørgsmålet om denne type af data bliver benyttet optimalt, og om disse data ikke i visse tilfælde også bliver benyttet forkert? Disse forhold er bl.a. beskrevet i Troldborg (2004) med konkrete anvendelser på områder på Fyn og Sjælland. I det efterfølgende, som er inspireret af Varni og Carrera (1998), vil grundlaget for brug af aldersdateringer blive diskuteret, og der vil blive præsenteret forskellige metoder til simulering af grundvandetets alder og aldersspredning.

18.5.1 Metoder til bestemmelse af grundvandetets alder

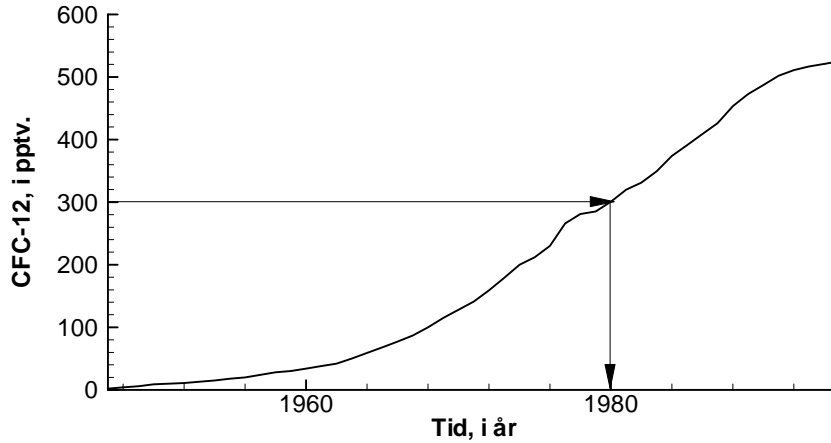
Grundvandetets alder beskrives typisk ud fra følgende definitioner;

- Tilsyneladende alder (apparent age)
- Kinematiske alder (kinematic age)
- Middellalder og aldersfordeling (mean age, age distribution)

Den tilsyneladende alder er den alder en grundvandsprøve tilskrives ved en sammenligning mellem koncentrationen af en miljøtracer målt i en vandprøve fra grundvandszonen og det historiske indhold af samme tracer i nedbør. Et eksempel er givet i figur 18.10, hvor den tidlige variation i koncentrationen af CFC-12 i nedbøren er vist.

Er CFC-12 koncentrationen i en grundvandsprøve målt til 300 pptv vurderes vandet at stamme fra 1980. Er prøven udtaget i 1995 er den tilsyneladende alder 15 år. Hertil skal lægges opholdstiden i den umættede zone. Cook and Solomon (1995) og Engesgaard et al. (2004) har undersøgt betydningen af de fysiske strømnings- og transportprocesser på opholdstiden for CFC gasser i den

umættede zone, der generelt er styret af diffusion i gasfasen. Er tykkelsen af den umættede zone mindre end f.eks. 15 m kan der ofte benyttes simple analytiske løsninger til udregning af opholdstiden. I det følgende vil den umættede zone dog blive ignoreret.



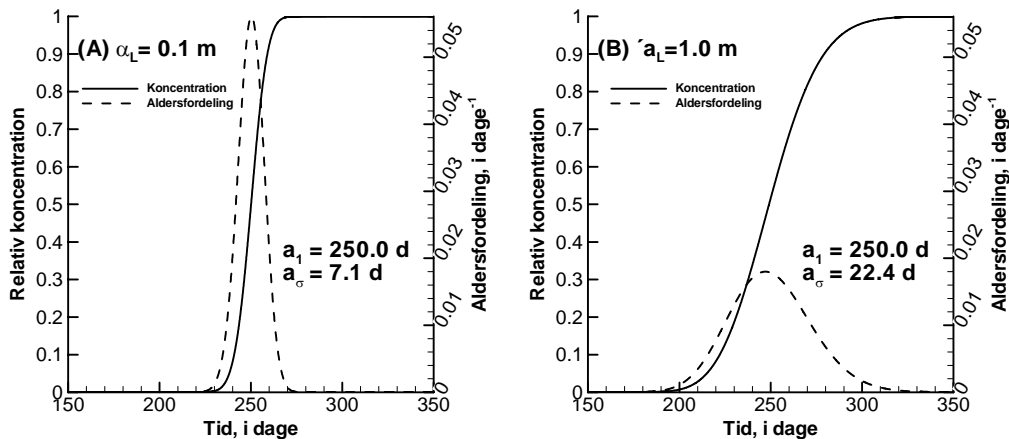
Figur 18.10 Koncentrationen af CFC-12 i nedbør. Linierne viser hvordan den tilsyneladende alder udregnes på basis af en grundvandsprøve med en koncentration på ca. 300 pptv.

Et simpelt 1D numerisk eksperiment med stoftransport kan bruges til at anskueliggøre betydningen af kinematisk alder, middelalder og aldersfordeling. Stoftransporten langs en 1000 m lang strømlinie undersøges, hvor porevandshastigheden er sat til $v = 2$ m/dag. I første omgang betragtes en konservativ tracer der fastholdes på en koncentration på $c_0 = 1$ ved indløbet. Figur 18.11a viser gennembrudskurven i $L = 500$ m for et valg af langsgående dispersivitet på $\alpha_L = 0.1$ m. Som forventet sker gennembruddet ($c_0 = 0.5$) efter 250 dage, og det har den karakteristiske S-form. Uden dispersion ville gennembruddet være fuldstændig skarpt. Den kinematiske alder i dette system er givet ved L/v og er identisk med en "partikel-alder", dvs. opholdstiden af en partikel i systemet. Den kinematiske alder kan udregnes for andre systemer, hvor porevandshastigheden ikke er konstant jvnf.:

$$a_k = \int_a^b \frac{dl}{v} \tag{18.15}$$

hvor a_k er den kinematiske alder. Integralet på højresiden integrerer porevandshastigheden langs strømlinien l fra position a til b . I tilfældet med konstant hastighed fås $a_k = (b-a)/v$ eller L/v . Princippet er identisk med den metode, som benyttes i MODPATH, og er analog til ligning (18.6). Den kinematiske alder giver kun den korrekte alder i et strømningssystem, hvor der ikke er dispersion, dvs. for systemer med "piston flow" eller "plug flow".

Som det også fremgår af figur 18.11a betyder dispersion, at der både ankommer stof før og efter gennembruddet. Stof ankommer allerede efter ca. 230 dage og fuldt gennembrud er først opnået efter ca. 270 dage. Ganske lidt dispersion betyder derfor en betydelige spredning i alderen på det vand, der når frem til $L = 500$ m. Da dispersion øges med afstand vil aldersspredning også øges med afstanden. Figur 11b viser resultatet for $\alpha_L = 1.0$ m. Som det ses, er aldersspredningen på det yngste og ældste vand nu oppe på 100 dage (ud af en middelopholdstid på 250 dage). Simple numeriske eksperimenter med stoftransport giver derfor en kvantitativ vurdering af, hvor præcis den kinematiske alder er.



Figur 18.11 Gennembrudskurver (F-kurver) samt aldersfordelinger for to tilfælde; (A) lav dispersion, $\alpha_L=0.1$ m og (B) høj dispersion, $\alpha_L=1$ m. Middellaldren (a_1) og spredning (a_σ) er også vist.

Det er imidlertid ønskeligt at kunne angive mere præcise estimater for aldersspredning. Danckwerts (1953) og Levenspiel (1999) viser, hvordan stoftransportforsøg (i laboratoriet eller ved brug af modeller) kan bruges til at angive aldersfordeling;

$$a(t) = \frac{dF}{dt} = \frac{d(c/c_0)}{dt} \tag{18.16}$$

hvor $a(t)$ er aldersfordelingen (Residence Time Distribution, RTD) og $F = c/c_0$ er den relative koncentration. Aldersfordelingen svarer derfor til hældningen på F-kurven og det gælder;

$$\int_0^\infty a(t)dt = 1 \tag{18.17}$$

På figur 18.11a og 18.11b ses aldersfordelingen ved $L = 500$ m, og i begge tilfælde er arealet under aldersfordelingskurven 1. Ved stigende dispersion fås en mere spredt aldersfordeling. Aldersfordelingen kan karakteriseres ved brug af simple statistiske mål, f.eks. middellalder (a_1) og aldersspredning (a_σ). Figur 18.11 viser, at middellaldren er konstant i de to tilfælde (250 dage) og altså upåvirket af dispersionsprocesser, mens aldersspredningen er stærkt afhængig af dispersion (stiger fra ca. 7 til 22 dage).

Aldersfordelingerne vist i figur 18.11 er pænt Gaussiske (klokkeformet). Det skyldes at transportprocesserne kun er styret af advektion og dispersion. Hvis andre transportprocesser var tilstede, såsom diffusion mellem mobilt og ikke-mobilt vand, ville gennembrudskurven ikke længere være pænt S-formet og aldersfordelingen ville blive skæv.

Metoden kan udnyttes i andre tilfælde med mere komplicerede strømmingsystemer. Forudsætningen er blot at gennembrudskurven præsenteres som en F-kurve, dvs. en normaliseret koncentrationskurve (nemtest ved at tildele indløbskoncentrationen værdien $c_0=1$), at grundvand kun kan strømme ind og ud en gang (closed vessel boundary condition) og at fluxe af vand til modellen tildeles samme koncentration over alt. EXCEL eller MATLAB kan bruges til at udregne middelværdi og spredning. Et eksempel vises senere.

Ulempen ved ovennævnte metode er, at det kun giver punktinformation omkring aldersfordelingen og de statistiske mål herfor. Goode (1996), Varni & Carrera (1998) og Engesgaard & Molson (1998) viser hvordan en stoftransportmodel kan udnyttes til direkte at simulere middellalder og aldersspredning. For eksempel er 1D transportligningen for middellalder, a_1 ;

$$\frac{\partial a_1}{\partial t} + v \frac{\partial a_1}{\partial x} - D \frac{\partial^2 a_1}{\partial x^2} = 1 \quad (18.18)$$

og variansen på alder, a_2 (dvs. variansen på a_1 , dog med hensyn til origo);

$$\frac{\partial a_2}{\partial t} + v \frac{\partial a_2}{\partial x} - D \frac{\partial^2 a_2}{\partial x^2} = 2a_1 \quad (18.19)$$

Disse ligninger gælder også i 3D. Transportligningen for middelalder svarer til en almindelig transportligning, men med et 0-ordens reaktionsled på +1. Det svarer til at alderen stiger med $+1 \cdot \Delta t$ for hver tidsskridt.

Transportligningen for variansen på alderen er stort set identisk på nær højre-siden, hvor et 0-ordens led svarende til $2a_1$ er indbygget. En hvilken som helst stoftransportmodel kan derfor ombygges til at simulere den rumlige fordeling af middelalder og varians på alderen. Først simuleres a_1 med en kendt og konstant reaktiv konstant (+1), dernæst a_2 med en nu kendt, men rumlig variabel reaktiv konstant ($2a_1$). Det er i højere grad af interesse at kende variansen eller spredningen omkring middelalderen, der udregnes som;

$$a_\sigma = \sqrt{a_2 - a_1^2} \quad (18.20)$$

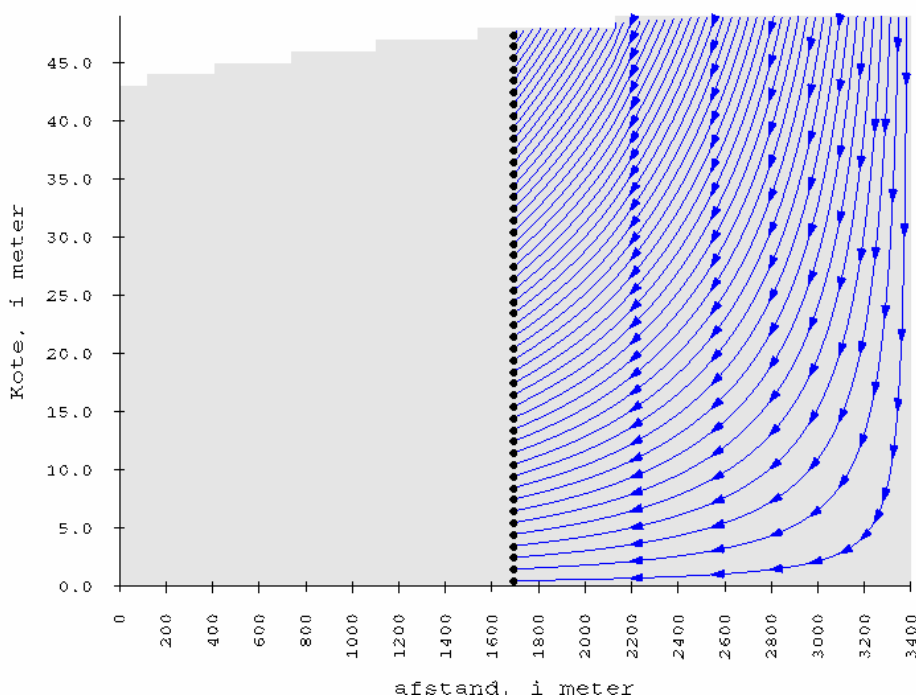
Som randbetingelser til begge ligninger angives alderen og variansen af alderen. En direkte simulering af alder og varians fungerer derfor også bedst for oplande, hvor vand kun tilføres via netto-infiltration, da alderen og variansen er kendt, nemlig nul. Løses transportligningerne til der er opnået steady-state fås middelalderen af grundvandet og den tilhørende varians/spredning. Værdierne for a_1 og a_σ i det numeriske eksperiment er vist i figur 18.11.

18.5.2 Eksempler

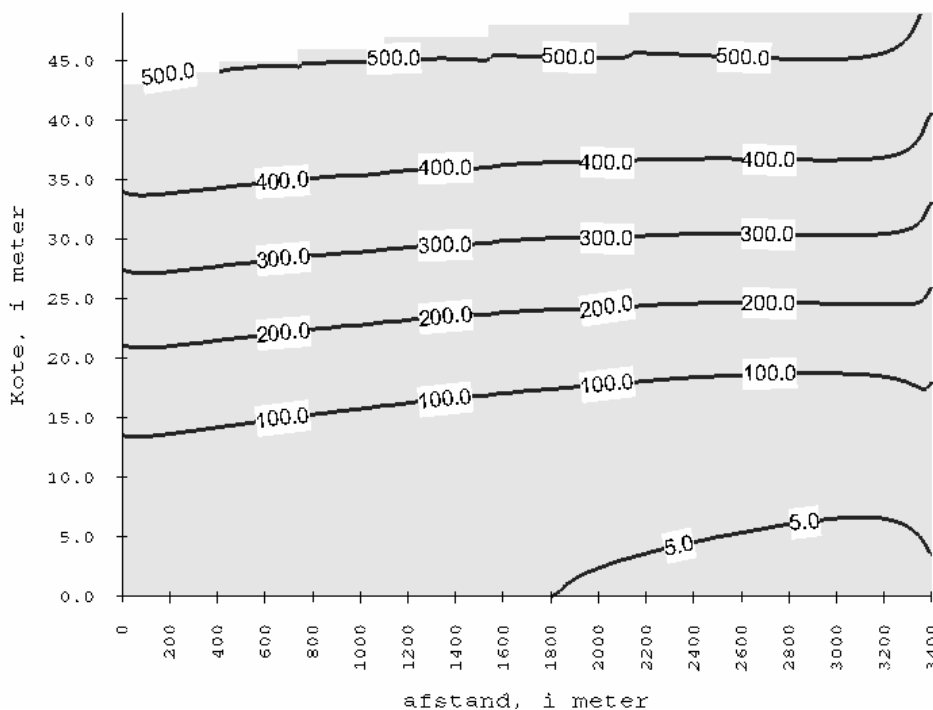
De forskellige metoder til aldersdatering af grundvand illustreres ved et simpelt 2D eksempel, figur 18.12. Inspiration til eksemplet er hentet fra Rabis bæk (Engesgaard et al., 1996; Engesgaard og Molson, 1998; Engesgaard et al., 2004). MODFLOW, MODPATH og MT3DMS er benyttet. Profilet er 3400 m langt og med et frit grundvandsspejl der stiger fra 42.5 m til ca. 49 m. Grundvandsmagasinet er antaget homogent, dog vil variation i dispersion afspejle det manglende kendskab til rumlige variationer i hydraulisk ledningsevne. Det hydrauliske trykniveau er fastholdt til 42.5 m i venstre side, netto-infiltrationen er sat til 500 mm/år, mens højre side (grundvandsskel) og bunden (impermeabel) er no-flow rande. Hydraulisk ledningsevne er $K=25$ m/dag og porøsiteten er 0.3. Diskretiseringen er specificeret til hhv. $\Delta x = 20$ m og $\Delta z = 1$ m.

I det følgende vil aldersfordelingen over dybden i afstand $x = 1700$ m blive undersøgt. For eksempel viser figur 18.12 de simulerede partikelbaner til dette profil. Afstanden fra pil til pil svarer til 10 års transportafstand. Som det fremgår, vil en partikel ramme dette profil med vidt forskellig alder. Et filter der eksempelvis spænder over intervallet kote 20 - 30 m vil sample vand med en alder mellem ca. 15 - 25 år. Hvis filterets bund sænkes til kote 10, vil det ældste vand være ca. 50 år gammelt. Eksemplet viser, at jo større længde filteret har, des større aldersspredning kan det samlede vand forventes at have. Middelalderen af det samlede vand vil afhænge af både filterets længde og placering.

I en given kote kan den kinematiske alder udregnes ved at MODPATH simulerer, hvor lang tid det tager hver enkel partikel at blive transporteret baglæns til grundvandsspejlet. Denne er vist i figur 18.14. Den kinematiske alder varierer på en ikke-lineær måde fra ca. 0 år ved grundvandsspejlet til tæt på 130 år ved bunden.

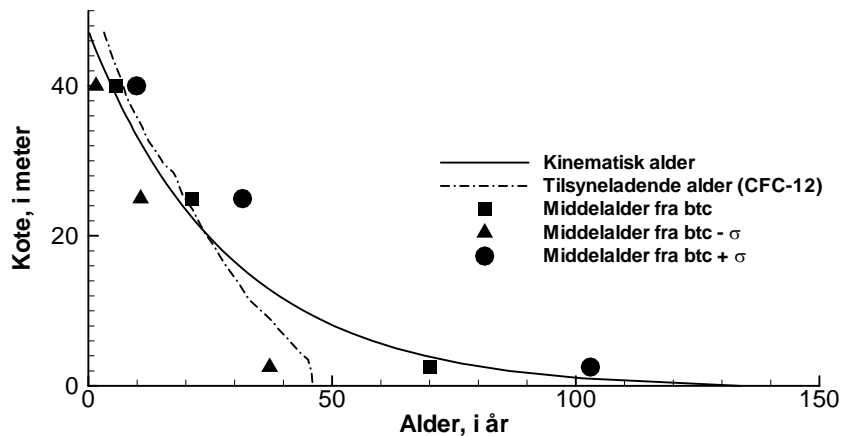


Figur 18.12 Simuleringsdomæne samt simulerede partikelbaner hen til profilet ved $x=1700$ m. Mellemrummet mellem de blå pile svarer til en opholdstid på 10 år. Det trappeformede grå område angiver grundvandsspejlets variation (fra 42.5 m til venstre til ca. 49 m til højre).



Figur 18.13 Simuleret fordeling af CFC-12 i 1995. Koncentrationen er angivet i pptv. Kurven vist i figur 1 er benyttet som randbetingelse. Læg mærke til at der er CFC-12 stort set overalt.

Figur 18.13 viser den simulerede CFC-12 fordeling i 1995, hvor $\alpha_L=5$ m og $\alpha_{tv}=0.05$ m. Som atmosfærisk inputfunktion er benyttet den i figur 18.10 viste. Læg mærke til, at med dette valg af dispersionsparametre bliver der simuleret CFC-12 stort set overalt i grundvandsmagasinet. Umiddelbart vil alderen derfor synes af at være mindre en ca. 50 år, da koncentrationen i vand fra før 1945 havde en CFC-12 koncentration tæt på 0, se figur 18.10. Ved at sammenholde den simulerede koncentration over dybden med figur 18.10 kan den tilsyneladende alder udregnes, se figur 18.14. Som ventet er den tilsyneladende alder mindre end 50 år. Kun i de øverste ca. 20 m er der en rimelig overensstemmelse mellem tilsyneladende og kinematisk alder. Ved bunden er forskellen over 80 år. Uoverensstemmelsen mellem den tilsyneladende og kinematisk alder i bunden må ikke misfortolkes som en forkert modelmæssig geologisk opbygning af grundvandsmagasinet. Det er ikke den kinematiske alder, der er forkert, men den tilsyneladende alder, som er tolket forkert ud fra ellers korrekte simuleringer af CFC-12 koncentrationsfordelingen. Den simulerede CFC-12 fordeling svarer til hvad man vil finde i en vandprøve fra et givet punkt i systemet, og repræsenterer dermed en målt tilsyneladende alder.

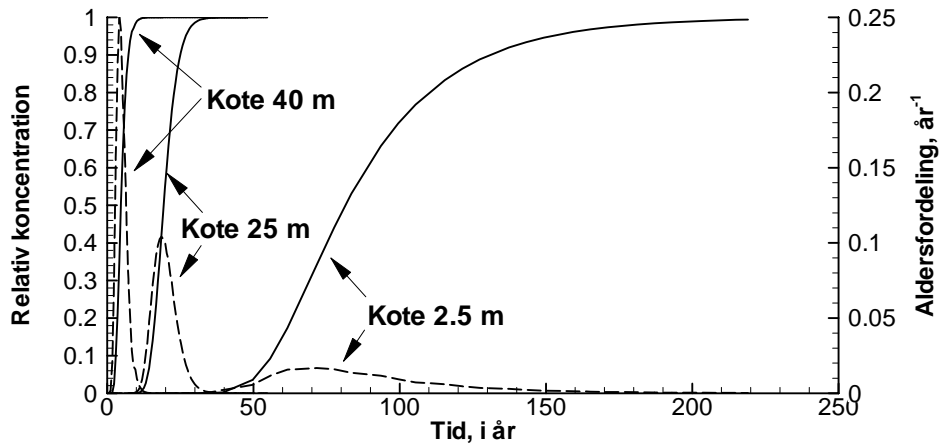


Figur 18.14 Forskellige udregnede og simulerede aldersfordelinger ved $x=1700$ m.

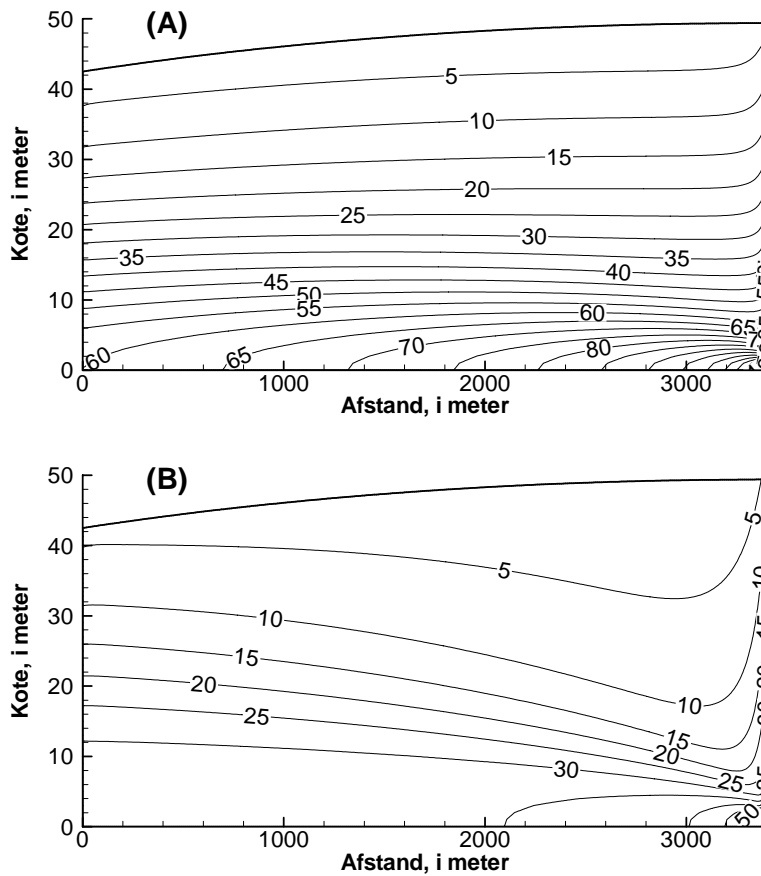
En simpel stoftransportsimulering, der følger principperne fra teori afsnittet, dvs. ligning (18.16), kan bruges til at teste, om modellen er god nok. Figur 18.15 viser gennembrudskurverne og aldersfordelingerne i tre forskellige dybder i samme profil ($x=1700$). Betydningen af dybde på gennembruddene og aldersspredningen fremgår tydelig. Jo dybere punktet ligger, jo senere kommer gennembruddet, men også med en betydelig aldersspredning, dels på grund af spredning langs samme strømlinie, men i høj grad også på grund af vertikal spredning på tværs af strømlinier.

Middellalder (a_1) og spredning (a_σ) kan udregnes for de tre punkter, figur 18.14. I de øverste 20 m følger middellalderen den tilsyneladende og kinematiske alder. I punktet lige over bunden er der stadig sammenfald mellem middellalder og kinematisk alder (primært fordi gennembrudskurverne i figur 18.15 er pænt S-formede og aldersfordelingerne derfor pænt Gaussiske). Det ses, at den tilsyneladende alder falder indenfor den observerede aldersspredning. Der er derfor ikke nogen umiddelbar grund til at forkaste grundvandsmodellen og samtidig må det konkluderes, at grundvand fra disse dybder er af meget variabel alder.

En alternativ stoftransportmodel (Engesgaard & Molson, 1998) er benyttet til at udregne den kontinuerte fordeling af middellalder og spredning. Disse er vist i figur 18.16 og giver et umiddelbart indtryk af, hvor man skal være meget omhyggelig med at fortolke på den tilsyneladende alder. Som det fremgår, bliver a_σ hurtigt mere end 10 år ved dybder større end 10-25 m. I områder med ganske ringe gennemstrømning (nederste højre hjørne) bliver middellalderen og aldersspredningen ganske betragtelig.

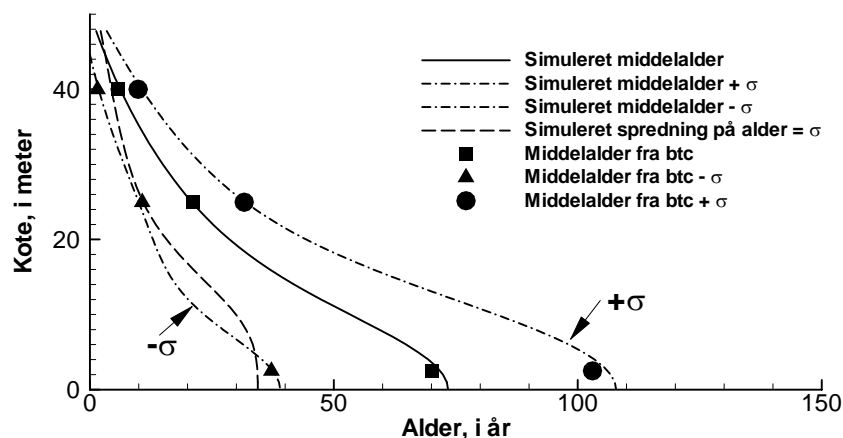


Figur 18.15 F-kurver (fuldt optrukket) og aldersfordelinger (stiplet) i forskellige niveauer. Læg mærke til at aldersfordelingerne er rimeligt Gaussiske (klokkeformede).



Figur 18.16 Direkte simulering af middelalder (A) og spredning (B) på alder. Fordelen ved denne metode er at den ikke kun giver punktvis information.

Figur 18.17 viser den simulerede middelalder og aldersspredning i det valgte profil. Der er god overensstemmelse mellem disse og de tilsvarende punktresultater, der er udregnet på basis af F-kurverne vist i figur 18.15. Er man derfor kun interesseret i at vurdere middelalder og spredning i udvalgte punkter (f.eks. filtre) kan man med fordel nøjes med at bruge en almindelig stoftransportmodel.



Figur 18.17 Direkte simuleret middelalder og spredning på alder i profilet $x=1700$ m. De tilsvarende værdier estimeret på basis af F-kurverne er også vist.

18.5.3 Diskussion af aldersdateringsmetoder

Det anbefales at udnytte stoftransportsimuleringer til assistance i fortolkningen af grundvandets alder. Brugen af stoftransportmodeller til simulering af F-kurver med efterfølgende udregning af middelalder og spredning har imidlertid både fordele og ulemper. Ulemperne er;

- Der skal benyttes en forholdsvis fin diskretisering i det vertikale plan. Hvis formålet er at udregne middelalderen og tilhørende spredning på det grundvand, der indvindes et givent sted, så bør den vertikale diskretisering nærme sig længden på filteret.
- Modellen skal simulere en tidsperiode der sikrer at hele F-kurven er opnået. Det kan betyde en simuleringsperiode på flere hundrede år, specielt hvis en F-kurve dybt nede i grundvandsmagasinet ønskes bestemt.
- Man kender ikke dispersionsparametrene. Disse, og specielt den vertikale dispersion, kan være afgørende for en korrekt simulering af aldersfordelingen i et punkt. Ofte bliver man dog overrasket over, hvor meget selv en ganske beskedne dispersion kan betyde for aldersfordelingen, hvilket kan være tilstrækkelig til netop ikke at forkaste en model på grund af uoverensstemmelse mellem den kinematiske alder (f.eks. fra en partikelsimulering) og den tilsyneladende alder.

Fordelene er;

- Det er en beskedne indsats der skal til for at lave en stoftransportsimulering. I det tilfælde hvor der eksisterer en allerede kalibreret strømningsmodel er det kun dispersionsparametrene der er ukendte. For forskellige værdier af dispersivitetene kan en F-kurve bestemmes og middelalder samt spredning udregnes.
- Der er mindre risiko for at forkaste en model der i sig selv er sund selvom den kinematiske alder ikke stemmer med den tilsyneladende alder. Middelalder plus spredning for forskellige dispersiviteter kan være med til at afgøre, om det kan sandsynliggøres at den tilsyneladende alder ligger indenfor aldersfordelingen.
- Der opbygges et erfaringsgrundlag for værdier for dispersion på regional skala. Som oftest kendes disse kun på lille skala. For eksempel, kunne man forestille sig aldersdateringerne udnyttet direkte til kalibrering af dispersion. Disse erfaringsværdier vil være af afgørende

betydning for senere simulering af f.eks. nitrattransport. Ofte nedbrydes nitrat i en given dybde (redox front) og transport af nitrat til disse dybder er bl.a. kontrolleret af vertikal dispersion.

Det skal her pointeres, at brugen af grundvandsalder bør delvis undgås i de tilfælde, hvor der eksisterer deciderede koncentrationsmålinger og troværdige inputfunktioner (Troldborg, 2004). Det er f.eks. tilfældet med CFC-12. Med andre ord, i de tilfælde kan man lige så godt simulere transport af traceren direkte.

18.6 REFERENCER

Cook, P.G., Solomon, D.K. (1995) Transport of atmospheric trace gases to the water table: Implications for groundwater dating with chlorofluorocarbons and Krypton 85, *Water Resour. Res.*, 31, 263-270.

Danckwerts, P.V. (1953) Continuous flow systems – distribution of residence times, *Chemical Eng. Sci.*, 2, 1-13.

DHI (2000) MIKE SHE Water Quality – User manual. Particle Tracking Module, DHI Water & Environment.

Engesgaard, P., Jensen, K.H., Molson, J., Frind, E.O., Olsen, H. (1996) Large-scale dispersion in a sandy aquifer: Simulation of subsurface transport of environmental tritium, *Water Resour. Res.*, 32, 11, 3253-3266.

Engesgaard, P., Molson, J. (1998) Direct simulation of groundwater age in the Rabis Creek aquifer, Denmark, *GROUND WATER*, 36, 4, 577-582, 1998.

Engesgaard, P., Højberg, A.L., Hinsby, K., Jensen, K.H., Laier, T., Larsen, F., Busenberg, E., Plummer, L.N. (2004) Transport and time lag of CFCs in the unsaturated zone, Rabis Creek, Denmark, *Vadose Zone Journal*, 3, 1249-1261.

Franke, O.L., Reilly, T.E., Pollock, D.W., LaBaugh, J.W. (1998) Estimating areas contributing recharge to wells, Lessons from previous studies, U.S. Geological Survey Circular 1174.

Goode, D. J. (1996) Direct simulation of groundwater age, *Water Resour. Res.*, 32, 289-296.

Henriksen, H.J., Rasmussen, P., Knudby C. (2000) Afprøvning af zoneringsmetoder, Miljøprojekt Nr. 553, Miljøstyrelsen.

Henriksen, H.J. (2001) Anvendelse af modellen: Vandbalance, grundvandsdannelse og indvindingsoplande, STÅBI i grundvandsmodellering, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Rapport 2001/56, Kap. 13, 13 pp.

Hinsby, K., Harrar, W.G., Nyegaard, P., Konrad, P.B., Rasmussen, E.S., Bidstrup, T., Gregersen, U., Boaretto, E. (2001) The Ribe formation in western Denmark – Holocene and Pleistocene groundwaters in a coastal Miocene sand aquifer, in Edmunds, W.M & Milne, C.J. (Eds.), *Palaeowaters in Coastal Europe: evolution of groundwater since the late Pleistocene*, Geol. Soc., London, Spec. Pub., 189, 29-48.

Levenspiel, O. (1999), *Chemical Reaction Engineering*, Wiley and Sons, 668 pp.

Miljøstyrelsen (1995) Metoder til udpegning af indvindingsoplande. Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, nr. 8.

Miljøstyrelsen (2000) Zonering, Detailkortlægning af arealer til beskyttelse af grundvandsressourcen, Vejledning fra miljøstyrelsen Nr. 3.

Pollock, D.W. (1994) User's Guide for MODPATH/MODPATH-PLOT, Version 3: A particle tracking post-processing package for MODFLOW, the U. S. Geological Survey finite-difference ground-water flow model, U.S. Geological Survey, Open-File Report 94-464, Reston, Virginia.

Reilly, T.E., Pollock, D.W. (1993) Factors affecting areas contributing recharge to wells in shallow aquifers, U.S. Geological Survey Water-Supply Paper 2412.

Troldborg L. (2004) The influence of conceptual geological models on the simulation of flow and transport in Quaternary aquifer systems, Ph.D. Thesis, Environment & Resources, Technical University of Denmark and Geological Survey of Denmark and Greenland.

Varni, M., Carrera, J. (1998) Simulation of groundwater age distribution, *Water Resour. Res.*, 34, 3271-3281.

Zheng, C. (1994) Analysis of particle tracking errors associated with spatial discretization, *Ground Water*, 32(5), 821-828.

Zheng, C., Bennett, G.D. (2002) *Applied contaminant transport modeling*, Second edition, John Wiley and Sons, Inc., New York.

Kapitel 19 METODER TIL USIKKERHEDSVURDERING

Anker Lajer Højberg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Identificering og karakterisering af usikkerhed, strategi og metoder til usikkerhedsanalyse.

ABSTRACT: Grundvandsmodeller anvendes rutinemæssigt af vandressourceforvaltere som arbejdsredskab i ressourceplanlægning og modelresultaterne vægter ofte tungt i en beslutningsproces, f.eks. i forbindelse med indsatsplanlægning. Der bliver således truffet afgørelser om eksempelvis dyrkningsaftaler, der i høj grad beror på modelsimuleringer. Dette stiller store krav til modellens troværdighed, der først og fremmest skal sikres gennem et fagligt højt niveau for modelopgavens udførelse samt systematisk kvalitetssikring af arbejdet. Men selv ved en ulastelig udført modelopgave vil simuleringerne være forbundet med usikkerhed. Det er vigtigt at usikkerheden om muligt kvantificeres, og inddrages i en beslutningsproces, så beslutningsgrundlaget inklusiv usikkerheden er kendt. Indenfor de senere år er der kommet stor fokus på usikkerhedsvurdering i forbindelse med anvendelse af grundvandsmodeller og stort set samtlige modelopgaver der udbydes i dag indeholder et krav om en usikkerhedsvurdering. Modeller er imidlertid ofte meget komplekse i opbygningen, hvor forskellige usikkerhedskilder influerer forskelligt og i varierende omfang på det endelige modelresultat. En usikkerhedsvurdering er derfor en meget kompleks opgave, der kræver stor omhu ved udførelsen. I dette kapitel gives der først en karakterisering af usikkerheder efterfulgt af en oversigt over de forskellige usikkerhedskilder, deres oprindelse og betydning. Derefter gives et forslag til en strategi for håndtering af usikkerheder under et projektførløb for grundvandsmodellering, og endelig gives en kort beskrivelse af forskellige metoder der kan anvendes til belysning af en usikkerheds betydning for modelresultatet.

19.1 INDLEDNING

Grundvandsmodeller er grundlæggende opbygget ud fra den filosofi, at vi er istand til observere de fysiske processer som forekommer i naturen, og samtidig er istand til at beskrive disse processer ved hjælp af matematiske udtryk og implementere dem i (numeriske) modeller. Fysiske systemer er imidlertid meget komplekse med stor grad af heterogenitet og mange indgående processer med indbyrdes interaktion. Dette stiller store krav, både mht. at få analyseret systemerne og efterfølgende at få dem beskrevet i de anvendte modeller. Det vil dog aldrig være muligt at observere de fysiske systemer komplet, ligesom det ikke er muligt at opstille numeriske modeller, der beskriver det fysiske system ned til mindste detalje. Under modelarbejdet er det derfor nødvendigt, at foretage nogle valg/fravalg mht. hvilke faktorer og processer der medtages og hvordan de beskrives. Alle modeller er således en simplificering af naturen og vil derfor altid være en tilnærmelse og modeller vil uvægerlig være forbundet med usikkerhed. Det at en model er usikker er i sig selv ikke en diskvalificering for anvendelse af resultaterne, det er først diskvalificerende i det øjeblik usikkerheden ikke erkendes og inddrages ved tolkningen af modelresultaterne.

Usikkerhedskilderne er mangfoldige og den store udfordring ligger i at erkende samtlige kilder, vurdere deres betydning og efterfølgende forsøge at kvantificere deres betydning. Indenfor den akademiske verden har der traditionelt været fokus på den del af usikkerheden der skyldes usikker-

heden på modelparametrene, og der er udviklet mange standardiserede metoder til kvantificering af netop dette bidrag til usikkerheden. Parameterusikkerheden er imidlertid kun ét af bidragene til den samlede usikkerhed. Eksempelvis vil der altid være usikkerhed mht. den opstillede konceptuelle model, f.eks. fejlagtig repræsentation af randbetingelser eller forkert struktur i den hydrogeologiske model. Konceptuel usikkerhed er først rigtigt kommet i fokus indenfor de senere år, og der er endnu ikke udviklet nogen formaliseret metode til, hvordan denne type usikkerhed kan håndteres. Der er således heller ikke nogen formel accepteret metode til analyse af den samlede model usikkerhed.

De mange usikkerhedskilder samt fraværet af generelt accepterede metoder gør usikkerhedsvurdering til en meget vanskelig disciplin. Ethvert modelleringsjob er unikt mht. både de fysiske forhold (geologi, hydrologi, processer, mv.) samt formålet med modelleringen (ressourcevurdering, vurdering af indvindingsstrategi, forureningsudbredelse, o.s.v.). Forskellige modeljobs vil typisk være associeret med forskellige usikkerhedskilder, ligesom betydningen af de enkelte usikkerhedskilder vil variere fra projekt til projekt. En velegnet metode til belysning af usikkerheden i ét modeljob vil således ikke nødvendigvis være optimal i andre projekter. Det er derfor nødvendigt at en usikkerhedsvurdering indledes med en analyse af hvilke usikkerhedskilder der eksisterer og i hvor høj grad de forventes at influere på model resultatet. Herefter udarbejdes en strategi, der sikrer at de bedste metoder udvælges, og at usikkerhedsaspektet inddrages i de relevante step i modelleringsprocessen. Har man først identificeret usikkerhederne er det optimale selvfølgelig at forsøge at reducere disse, f.eks. ved en målrettet monitorings/prøvetagnings kampagne. Men usikkerhederne vil aldrig kunne overkommes helt, og det vil derfor altid være nødvendigt med en vurdering af hvilken betydningen usikkerhederne har for det endelige modelresultat. I dette kapitel fokuseres der på hvordan denne usikkerhed kan håndteres og forsøges kvantificeret, når det ikke er muligt at reducere usikkerheden yderligere.

19.2 DEFINITION AF USIKKERHED

Før vi starter med at beskrive strategier for hvordan usikkerhederne i forbindelse med modelsimuleringer kan håndteres, er det relevant med en kort definition af usikkerheder. I den perfekte situation er alle størrelser kendt eksakt (determinisme), dvs. uden nogen usikkerhed. Denne situation er ønskværdig men uopnåelig, da enhver målemetode vil være behæftet med usikkerhed. I praksis er der imidlertid tilfælde, hvor det godt kan give mening at operere med determinisme, et eksempel herpå kan være indvindingsmængder. Foreligger der gode indvindingsdata, mht. placering af filtre og indvindingsmængder (ved anvendelse af dykpumper), vil usikkerheden på en indvinding i en størrelsesorden af 100.000 m³/år være meget lille, og ofte kunne negligeres i den samlede usikkerhedsvurdering. I dette tilfælde tror vi altså tilstrækkeligt på data til, at vi ikke overvejer en usikkerhedsvurdering.

Viser det sig imidlertid at de faktiske forhold afviger signifikant fra de data der er indlagt i modellen, så skyldes det fejl i datasættet. Dette kan f.eks. skyldes fejl under indtastning i den originale database eller når data indlægges i den numeriske model. Konsekvensen er, at der er introduceret fejl i vores model, som kan have væsentlig betydning for modelresultaterne. Men medmindre fejlen resulterer i åbenlyse fejl i modelresultaterne, er der stor risiko for at fejlen ikke opdages, og betydningen heraf på modelresultatet bliver altså heller ikke kvantificeret. Det kan altså give mening at skelne mellem fejl og usikkerhed. Når noget er usikkert er vi bevidste om at vi ikke kender den eksakte størrelse, men vi er ikke istand til at nærme os den sande størrelse yderligere. Usikkerhed er altså en stokastisk størrelse, der i bedste fald kan kvantificeres. Fejl derimod er en deterministisk størrelse, fejl optræder når vi har en mulighed (i hvert fald teoretisk) for, at dokumentere at noget er forkert. I eksemplet om indvinding fra før er det f.eks. muligt at opdage, hvis en boring eller indvindingsmængde er indlagt forkert ved en systematisk kontrol af data. Når vi snakker troværdighed af modeller vil såvel fejl som usikkerheder spille ind på modelresultatet. Hvordan vi kan håndtere usikkerheden er skitseret nedenfor, hvorimod fejl i form af fejlagtig modelopsætning, kun kan håndteres ved en grundig kvalitetssikring, som beskrevet i kapitel 23.

Usikkerhed inkluderer såvel objektive som subjektive aspekter. De subjektive aspekter afspejler, at forskellige personer kan have forskellige tiltro eller mistro til forskellige størrelser eller informationer. Der kan f.eks. være forskel i hvor godt man mener en given proces er beskrevet i den numeriske model, og dermed forskel i hvor troværdig man mener modelsimuleringerne er. I Refsgaard et al. (2005) er der givet følgende definition af usikkerhed

Definition (usikkerhed): En person er usikker hvis han/hun ikke har tiltro til de specifikke udfald af en hændelse eller handling. Årsagerne til den manglende tiltro kan inkludere en vurdering af informationerne som værende ikke-komplette, slørede, ukorrekte eller muligvis forkerte eller kan reflektere intrinsisk begrænsninger i den deterministiske repræsentation af komplekse systemer eller stokastiske processer.

19.3 KARAKTERISERING AF USIKKERHEDEN

For at kunne vælge en optimal metode til at vurdere betydningen af de enkelte usikkerhedsbidrag i forbindelse med modelsimulering, er det givtigt først at få usikkerheden karakteriseret. Dvs. identificere hvilke usikkerhedskilder der er tale om, hvor i modelopgaven de optræder, hvilke muligheder man har for at reducere usikkerheden og endelig i hvilken udstrækning det er muligt at kvantificere den del af usikkerheden, der ikke kan reduceres yderligere. Walker et al. (2003) foreslår en karakterisering af usikkerheden i tre dimensioner

1. Usikkerhedskilde - hvor i modellen optræder usikkerheden.
2. Niveau af usikkerhed - hvor stort kendskab har vi til usikkerheden.
3. Usikkerhedens natur - skyldes usikkerheden huller i vores viden, eller skyldes den naturlig variation.

Denne opdeling kan være nyttig i kommunikationen omkring usikkerhed, så det i højere grad står klart for de involverede parter (vandressourceforvalter, modellører og evt. interessenter) hvad der menes med usikkerhed og hvordan betydningen heraf kan vurderes. Den følgende karakterisering af usikkerheden følger løseligt definitionerne givet af Walker et al. (2003).

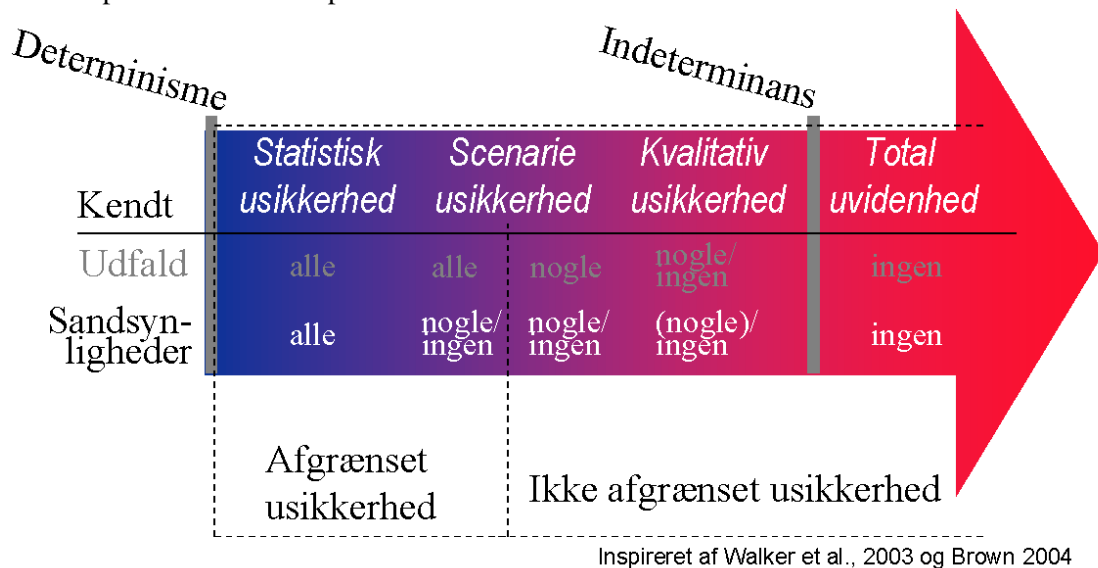
19.3.1 Usikkerhedskilde

Første led i en usikkerhedsanalyse er identifikation af hvor usikkerhederne optræder. Der kan grundlæggende identificeres to niveauer af usikkerheder i forbindelse med anvendelse af modeller. Det ene niveau omhandler de usikkerheder der er forbundet med den tekniske løsning af et modelleringsjob, hvorimod det andet niveau relaterer sig selve beslutningsprocessen i forbindelse med en vandforvaltningsopgave. Beslutningsprocessen varetages af vandressourceforvalteren og omhandler bl.a. identifikation af problemet (f.eks. grundvandetets sårbarhed overfor nedsvivende stoffer) og hele det politiske spil med involvering af interessenter og afdækning af deres præferencer og behov. Selve modelleringen indgår som et arbejdsredskab i hele denne proces, og det er kun usikkerheder i forbindelse med den tekniske løsning af modelleringen og selve anvendelsen af modellen der beskrives i dette kapitel.

Med denne indsnævring af usikkerhedsfeltet har vi to overordnede kilder til usikkerheden. Den første gruppe af usikkerhedskilder er associeret med selve modellen og relateret til den konceptuelle model, den numeriske model og opstillingen af denne, kalibreringen, de anvendte data etc.. Udover denne gruppe af usikkerheder har vi en anden kilde til usikkerhed relateret til anvendelse af modellen til scenario (management) simuleringer. Her optræder der usikkerhed i forbindelse med de grundlæggende antagelser vi gør om fremtidige forhold. Traditionelt omhandler en usikkerhedsvurdering kun den første gruppe af usikkerheder, dvs. de usikkerheder der er relateret direkte til modellen. Men da formålet med opstillingen af en grundvandsmodel i de fleste tilfælde er at kunne give et bud på en fremtidig situation under ændrede forhold, er det vigtigt også at inddrage usikkerheden netop mht. de fremtidige forhold. Som oplagt eksempel kan nævnes de fremtidige klimaforhold. De enkelte usikkerhedskilder beskrives mere detaljeret i afsnit 19.4

19.3.2 Niveau af usikkerhed

Niveauet for usikkerheden relaterer sig til, hvor godt vi er i stand til at beskrive og kvantificere usikkerheden, eller måske mere korrekt, hvor stor tillid vi har til vores viden omkring en given usikkerhedskilde. Man skal gøre sig klart, at usikkerhed i meget høj grad er en subjektiv størrelse. Beder man f.eks. forskellige eksperter komme med et bud på en størrelse samt mulig variationsinterval for en bestemt variabel, vil man få ligeså mange svar som personer man spørger. Vi kan blot tænke på bestemmelse af nettonedbøren, der praktisk talt diskuteres ved enhver modelopstilling. Der er næppe nogen der tvivler på, at den estimerede nettonedbør er behæftet med usikkerhed, men hvor stor denne usikkerhed er, vil der være delte meninger om. I dette tilfælde er det hverken muligt at estimere den sande nettonedbør eller den sande størrelse af usikkerheden på nettonedbøren. Vi må derimod søge at opnå en konsensus omkring en fornuftigt størrelse for usikkerheden, en konsensus der opnås gennem kvalificeret faglig diskussion, og som efterfølgende sikrer, at de involverede parter har samme opfattelse af usikkerheden.



Figur 19.1 Karakterisering af usikkerhed baseret på vores tillid til vores viden

Ifølge Walker et al. (2003) eksisterer der et helt spektrum af grader af vores kendskab til usikkerheden. Dette spektrum strækker sig fra den ideelle (men uopnåelige) situation af komplet determinisme i den ende til total uvidenhed i den anden ende af skalaen. Usikkerheden optræder i feltet mellem de to yderpoler og kan inddeles ud fra vort kendskab til usikkerhed som illustreret i figur 19.1. Som den ene yderpol har vi determinismen. Her er alle størrelser kendte, og der er således ingen usikkerhed og følgelig ikke behov for nogen usikkerhedsanalyse. Statistisk usikkerhed omhandler enhver form for usikkerhed der kan karakteriseres statistisk, dvs. vi kender alle mulig udfald (værdier) af variabelen, samt de tilhørende sandsynligheder. Den bedst kendte form for statistisk usikkerhed i relation til grundvandsmodellering er formentlig den del af usikkerheden, der skyldes usikkerheden på modelparametrene. Fra invers kalibrering kan der f.eks. opnås et estimat for usikkerheden på modelparametrene typisk i form af 95% konfidens intervaller (se kapitel 14). På baggrund af de estimerede 95% konfidens intervaller samt en antagelse om parameterens fordeling (typisk normal eller lognormal fordeling) er fordelingsfunktionen for modelparameteren beskrevet fuldstændigt og kan tjene som input i en statistisk usikkerhedsanalyse, se afsnit 19.6. Den statistiske usikkerhedsanalyse er dog ikke begrænset til modelparametrene, men kan anvendes i ethvert tilfælde, hvor der kan opnås en fuldstændig statistisk beskrivelse af usikkerheden.

Det er imidlertid langt fra i alle tilfælde at vi har et fuldstændigt kendskab til såvel det mulige udfaldsrum samt de associerede sandsynligheder. I mange tilfælde kan vi have et godt kendskab til udfaldsrummet (f.eks. et realistisk parameterinterval) men kun ringe eller ingen kendskab til sandsynlighedsfordelingen for parameteren. Usikkerhedskilder der falder indenfor denne kategori

benævnes scenario usikkerhed. Vi har mulighed for at kvantificere den maksimale betydningen af usikkerheden på modelresultatet (f.eks. ved at anvende en parameter værdi i hver ende af intervallet) men vi har ikke mulighed for at sige noget om hvor sandsynlige disse resultater er.

Vi kan også have en situation, hvor vi er bevidste om at vi har videnshuller, altså at vi ved der er faktorer vi ikke kender. Dette betyder at vi ikke kender det fulde udfaldsrum, og derfor ikke kan afgrænse usikkerhedsintervallet. I forbindelse med usikkerhedsvurdering er dette et meget ubehageligt tilfælde, idet vi er klar over, at resultaterne er usikre pga. vore videnshuller, men vi har ingen mulighed for at kvantificere denne end ikke som "worst" eller "best" situationer, da vi ikke kan afgrænse udfaldsrummet. Denne type af usikkerheder vil oftest kun være mulig at håndtere kvalitativt, altså give kvalitative bud på usikkerhedens indflydelse på modelresultatet. I litteraturen benævnes denne type af usikkerhed ofte "erkendt uvidenhed", til forskel fra den totale uvidenhed, hvor vi end ikke er klar over at vi har videnshuller. I denne situation beskæftiger vi os slet ikke med

"...as we know, there are known-knowns; there are things we know we know; we also know there are known-unknowns; that is to say we know there are some things we do not know; but there are also unknown-unknowns; the ones we don't know we don't know."

Donald Rumsfeldt

usikkerhed da vi ikke har erkendt, at der er en usikkerhed.

19.3.3 Usikkerhedens natur

Den sidste dimension relaterer sig til den bagvedliggende årsag til usikkerheden. Her skelnes der mellem *epistemisk usikkerhed* og *stokastisk usikkerhed*. Epistemisk usikkerhed er relateret til den usikkerhed, der skyldes at vores viden ikke er perfekt. Dette kan f.eks. være et kvalitativt eller kvantitativt dårligt datamateriale, manglende kendskab og forståelse af det fysiske system, eller manglende viden om hvordan processerne bedst beskrives i en numerisk model. Stokastisk usikkerhed er usikkerheder der skyldes den naturlige variabilitet af det fysiske system. Mens det er muligt at reducere den epistemiske usikkerhed, ved supplerende data indsamling eller forskning/udvikling, er det ikke muligt at reducere den del af usikkerheden, der stammer fra den naturlige variabilitet. Ved supplerende undersøgelser vil det i nogle tilfælde være muligt at opnå en bedre karakterisering af variabiliteten, som gør det muligt at kvantificere denne type af usikkerhed bedre, men usikkerheden fra denne usikkerhedskilde kan ikke reduceres. Af denne grund benævnes de to typer også reducerbar og ikke-reducerbar usikkerhed.

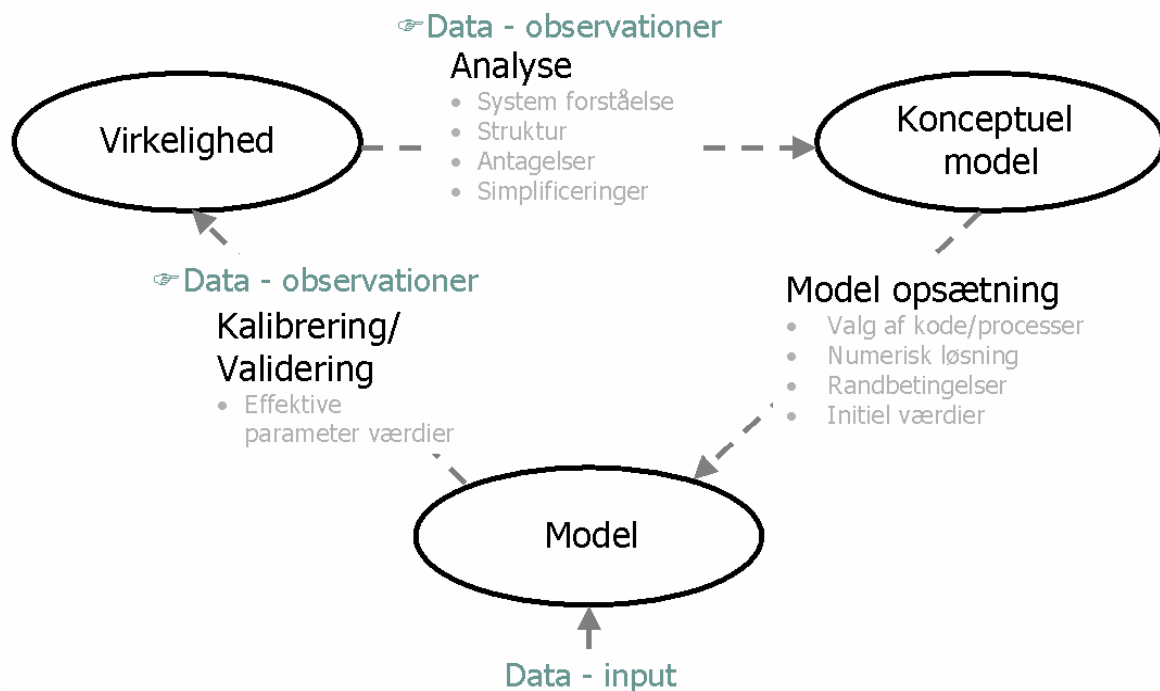
19.4 USIKKERHEDSKILDER

I afsnit 19.3.1 blev der identificeret to grupper eller lokaliteter for usikkerheden. Figur 19.2 giver en skematisk fremstilling af den første gruppe, dvs. usikkerhedskilder vedrørende modelopstilling, kalibrering/validering og data. Baseret på vores iagttagelser af virkeligheden, dvs. observationsdata, analyserer vi virkeligheden og opsætter en konceptuel model, der indeholder vores opfattelse af virkeligheden. Herefter opsættes en stedspecifik model, hvor den deskriptive konceptuelle model oversættes til en numerisk grundvandsmodel. Sidste led er kalibrering og validering af modellen, der skal sikre at vores model beskriver det betragtede system indenfor nogle prædefinerede kriterier. Samtlige af de beskrevne led indeholder usikkerhedskilder, der vil kunne forplante sig til modelresultaterne.

19.4.1 Konceptuel model

I forbindelse med opstilling af den konceptuelle model skal der foretages en række overvejelser og tolkninger som beskrevet i kapitel 4. Vores succes i forbindelse med konstruktionen af en konceptuel model afhænger selvfølgelig af det tilgængelige datamateriale, både mht. kvantitet og kvalitet, men beror i mindst lige så høj grad af vores evne til at ekstrahere informationer fra de tilgængelige data. Dvs. vi er i stand til at opnå en tilstrækkelig forståelse af systemet, mht. de fysiske processer og systemets struktur. Vi skal f.eks. være i stand til at identificere, hvilke processer der er de domi-

nerende, og hvilken interaktion der er mellem forskellige processer og betydningen heraf. Et andet springende punkt i opstilling af en konceptuel model er de hydrogeologiske forhold. Disse har vi kun en meget begrænset indsigt i fra eksempelvis borerer eller geofysisk, og vores konceptuelle geologiske/hydrogeologiske model vil derfor primært være et resultat af en tolkning. Den sparsomme information vi har omkring den geologiske struktur åbner op for udformning af et antal af mulige konceptuelle hydrogeologiske modeller. Så længe disse er i overensstemmelse med vores geologiske viden, og i øvrigt virker fornuftig ud fra kendskab til den regionale dannelseshistorie, vil de alle være sandsynlige konceptuelle modeller, og baseret på observationer alene har vi ingen mulighed for at vurdere i hvilken grad vores tolkning er korrekt. Opstilling af den konceptuelle model indbefatter ikke alene at opnå en forståelse af systemet men også at vi er istand til at simplificere og idealisere vores system, så vi kan håndtere det i en numeriske model, på en måde der er konsistent med de problemer vi ønsker at anvende modellen til at løse. Heri ligger, at vi skal være istand til at udvælge de dominerende processer og sikre at disse ikke simplificeres i en sådan grad at de ikke afspejler de naturlige processer vi ønsker at belyse. Det er således uundgåeligt at den konceptuelle model er forbundet med usikkerhed.



Figur 19.2 Skematisk fremstilling af modelleringsforløb, med angivelse af typiske usikkerhedskilder

19.4.2 Model (sted-specifik model)

Når den konceptuelle model er på plads, skal den konverteres til en numerisk model (kapitel 6). Dette betyder i første omgang, at der skal foretages et valg af, hvilken kode og evt. hvilken GUI (graphical user interface) der skal anvendes. Ved valg af kode er det oplagt at vælge en kode der kan håndtere samtlige processer identificeret i den konceptuelle model og i samme detaljeringsgrad. Dette er imidlertid ikke altid muligt eller er i konflikt med andre interesser, f.eks. ønsket om anvendelse af en bestemt kode og GUI. I nogle tilfælde vil der være god ræson i at bibeholde en velkendt kode fremfor at vælge en ny ukendt kode med en bedre procesbeskrivelse. Det der vindes ved en bedre procesbeskrivelse i form af et mere korrekt modelresultat kan sættes over styr fordi modelkoden er ukendt for modelløren, hvorved der er større risiko for at der sker fejl under model opsætningen. Er modelkoden og/eller GUI'en ligeledes ukendt for vandressourceforvalteren, er der

risiko for at modellen ikke anvendes så aktivt i beslutningsprocessen som oprindeligt ønsket. Generelt bør det dog tilstræbes, at der vælges en kode der er istand til at beskrive de identificerede processer i den ønskede detaljegrad. Fraviges dette, skal det tages i mente som en ekstra usikkerhedskilde, der kan påvirke det endelige simuleringresultat.

I en numeriske model repræsenteres det fysiske system vha. et sæt af partielle differentiaalligninger der løses numerisk ved anvendelse af en given numerisk løser (solver), som beskrevet i kapitel 8. Jo strengere konvergenskriterium der opstilles, jo tættere vil den numeriske løsning være på den sande løsning. I praksis vil løsningen dog altid kun være tilnærmelsesvis, idet der vil forekomme afrundingsfejl og numeriske fejl på grund af computerens maskinpræcision. For langt de fleste modelopgaver vil disse to fejlkilder dog være uden praktisk betydning, og antages det, at der ikke er fejl i modelkoden, dvs. at denne er verificeret for de forhold den anvendes under (Kapitel 6), vil fejl i den numeriske løsning som regel kunne styres ved anvendelse af et tilstrækkeligt strengt konvergenskriterium. Der kan dog forekomme endnu en type af fejl i forbindelse med den numeriske løsning, der hænger nøje sammen med den valgte diskretisering (kapitel 8). Jo grovere diskretisering der anvendes jo dårligere vil heterogeniteten i eksempelvis den hydrauliske ledningsevne kunne opløses. En finere diskretisering er således at foretrække da den giver mulighed for en mere korrekt gengivelse af de hydrogeologiske forhold og dermed en forventelig mindre usikkerhed. Benyttes grundvandsmodellen kun til belysning af strømningsforholdene er det tilstrækkeligt med en rumlig diskretisering der netop kan opløse de hydrogeologiske enheder der er identificeret i den konceptuelle model, og der opnås ikke et mere korrekt resultat ved en finere diskretisering, som for eksempel opdeling af et samlet magasin i to beregningslag. Omvendt forholder det sig med transport og partikelbane simuleringerne (kapitel 18), hvor en finere diskretisering i såvel rum og tid generelt fører til et mere korrekt beregningsresultat.

Da modeller ikke har uendelig udstrækning i rummet er det nødvendigt at definere modelområdets samspil med omgivelserne gennem valg af ydre modelrandbetingelser, ligesom indre randbetingelser skal specificeres (kapitel 7). Ideelt bør de ydre randbetingelser placeres så de er sammenfaldende med naturlige hydrologiske rande, men dette kan ofte være problematisk bl.a. fordi det kan være svært at identificere naturlige randbetingelser. Problemet kompliceres endvidere af at randbetingelserne kan være tidsvarierende, både på kort sigt, f.eks. sæsonvariationer, og på lang sigt i form af klimatiske variationer. I nogle tilfælde kan der også være tvivl om hvorledes en randbetingelse skal repræsenteres. Er det eksempelvis tilstrækkeligt at anvende et fastholdt potentiale til repræsentation af et vandløb, eller er det nødvendigt med en mere detaljeret beskrivelse. Valget af randbetingelser vil altid have indflydelse på modelresultatet og er derfor en potentiel usikkerhedskilde.

Er der tale om en dynamisk model vil valget af initialbetingelserne introducere endnu en usikkerhedskilde, se kapitel 10. Det vil aldrig være praktisk muligt at specificere "korrekte" startbetingelser for en dynamisk model, og modellen skal derfor bruge en opvarmningstid til at "falde på plads". Usikkerheden pga. initialbetingelser kan reduceres ved anvendelse af lange opvarmningsperioder, men vil sjældent kunne elimineres helt.

Der er flere usikkerhedskilder knyttet til de anvendte modelparametre. For det første er mange af de fysiske parametre ikke direkte målbare, men skal estimeres på baggrund af en analyse af et undersøgelsesresultat, som eksempelvis prøvepumpning. Endvidere spiller skalaforhold en vigtig rolle. Hvor repræsentativ er eksempelvis en prøvepumpning eller en slug-test på gridskala niveau (10^2m) eller for en zonerig (10^3m). Dette afhænger i høj grad af den naturlige variabilitet, men selv i det ideelle tilfælde med fuldstændig homogene forhold, er det problematisk at overføre værdier fra felt observationer til modelsystemet, se i øvrigt kapitel 11.

19.4.3 Data

I forbindelse med grundvandsmodellering kan vi lave en grov opdeling af data i to grupper: observationsdata og input data. Observationsdata anvendes i første omgang til opstilling af den konceptuelle model og kan i denne forbindelse være mange forskellige datatyper, såsom "hårde" data i form af topografi, boreprofiler, geofysiske data, geokemiske data og de mere "bløde" datatyper, der f.eks. kan være visuel inspektion eller interviews. Alle datatyperne vil være behæftet med en ob-

servationsfejl. I forbindelse med de hårde datatyper er observationsfejlene ofte relateret til præcisionen med hvilken vi er istand til at måle størrelsen, f.eks. en kemisk analyse eller kote fastsættelse af et målepunkt. I disse tilfælde vil det ofte være muligt at give en god beskrivelse af usikkerheden, og observationerne rapporteres også rutinemæssigt med angivelse af usikkerheden. Mere problematisk forholder det sig mht. de hårde data, hvor det ikke er direkte muligt at estimere en usikkerhed, hvor sikker er f.eks. den geologiske beskrivelse af en borekerne. I disse tilfælde er det, som tilfældet også er for de bløde data, kun muligt at vurdere usikkerheden subjektivt. Under kalibrering og validering af modellen anvendes observationsdata igen til bedømmelse af modellens evne til at genskabe det fysiske system. Indenfor grundvandsmodellering er der som regel tale om potentiale- og afstrømningsdata og i sjældne tilfælde også koncentrationsdata. Usikkerheden på disse data vil i overvejende grad stamme fra observationsfejl, se kapitel 12, dvs. præcision af vores instrumenter og teknik, samt skala problematikken.

Input data f.eks. indvindingsdata og nettonedbør, vil ligeledes være behæftet med usikkerhed. Usikkerheden på indvindingsdata vil i reglen kun være relateret til den præcision hvormed vi kan måle indvindingen, og eksempelvis er istand til at fordele den ud på filterniveau med den sande fordeling mellem de forskellige indtag. I fuldt integrerede modeller er nettonedbørsberegninger integreret i modelsimuleringerne, men ofte er nettonedbøren beregnet vha. et modul, der ikke er koblet til grundvandsmodellen. I begge tilfælde vil der optræde de samme usikkerheder som beskrevet ovenfor mht. input data, dvs. hvor sikre er målingerne af potentiel fordampning og nedbør (herunder bestemmelsen af korrektionsfaktorerne). Anvendes nettonedbør bestemt af en anden model, skal man være opmærksom på at disse resultater ligeledes vil være influeret af alle de ovennævnte usikkerhedskilder på den konceptuelle model, modelopstilling osv.

19.4.4 *Management scenarier*

Modeller anvendes i udbredt grad til scenario kørsler, dvs. til at synliggøre effekten af ændrede forhold, hvadenten disse er menneskeskabte eller naturbetingede. En betydelig usikkerhed i denne forbindelse er netop, hvordan forholdene ændrer sig i fremtiden. Et oplagt problem er, at vi ofte gerne vil give et bud på ressourcens udnyttelse under ændrede klimaforhold, men vi ved reelt ikke hvordan klimaet ændres. Men der også store usikkerheder forbundet med de menneskeskabte forhold. Hvordan vil de politiske forhold ændre sig og ændre vores livsstil? Vil der f.eks. indføres krav om reducerede husdyrhold med en mindre kvælstofbelastning tilføje, eller indføres der nye afgrøder og dermed andre problemstillinger.

Generelt vil usikkerheden på de fremtidige forhold stige i takt med længden af den betragtede tidshorisont. Over meget korte perioder vil ændringen i forholdene være velkendte som f.eks. neddrøsling af indvindingen til halv kapacitet i næste uge. Men ved blot mellemlange tidshorisonter er det vigtigt at overveje betydningen af denne usikkerhed. Dette kan eksempelvis være relevant, når der tages beslutningen om hvor, hvordan, og hvor meget af et magasin der skal beskyttes. Der skal tages stilling til om det er tilstrækkeligt kun at beskytte infiltrationsområdet udpeget på baggrund af de aktuelle forhold, eller om der skal tages hensyn til evt. ændrede forhold.

19.5 HÅNDBOG AF USIKKERHED

I de nedenstående afsnit er der givet nogle bud på hvorledes usikkerheden kan håndteres i forbindelse med en grundvandsmodellering. Afsnittene fokuserer på, hvordan man får lavet en strategi der sikrer, at relevante usikkerhedskilder identificeres, og at betydningen af disse bliver vurderet i projektet. Der vil løbende blive henvist til nogle metoder (markeret ved understregning), der kan anvendes til at belyse betydningen af de enkelte usikkerhedskilder. Disse metoder er kort forklaret i afsnit 19.6.

19.5.1 *Elementer i en usikkerhedsvurdering*

Indenfor den akademiske verden har det længe været erkendt at numeriske modeller er behæftet med usikkerhed. Traditionelt har der været fokus på den del af usikkerheden der skyldes usikkerheden på modelparametrene samt input data, og der er udviklet mange metoder (primært de statisti-

ske metoder) til kvantificering af netop dette bidrag til usikkerheden. Modsat forholder det sig mht. den del af usikkerheden, der stammer fra usikkerheden i den konceptuelle model. Dette område er først rigtigt kommet i fokus indenfor de senere år (Neumann & Wierenga, 2003), skønt det længe har været kendt at netop den konceptuelle model ofte kan være den mest betydende i forbindelse med en usikkerhedsanalyse. På trods heraf er der endnu ikke udviklet nogen formaliseret metode til, hvordan usikkerheden på den konceptuelle model kan håndteres.

Udviklingen i den akademiske verden afspejles i den praktiske anvendelse af grundvandsmodeller. I dag tilbyder de fleste GUIs én eller flere metoder til analyse af usikkerheden på modelparametrene/input data (herefter blot modelparametre), og model usikkerhed bliver ofte sat lig med usikkerheden på modelparametrene. Usikkerhedsvurderingerne bliver således ofte reduceret til en vurdering af parameterusikkerhedens betydning på modelresultatet, en øvelse der udføres i "halen" af den kalibrerede og validerede model. Denne type af usikkerhedsvurderinger fejler alt for ofte mht. en forudgående vurdering af hvilke usikkerhedskilder, der er i den konkrete modelopgave og hvilke usikkerhedskilder der har den største betydning for modelresultatet set i forhold til modelens anvendelsesområde. Ved at sidestille modelusikkerhed med en parameterusikkerhed risikerer man derfor ofte at underestimere den sande model usikkerhed, da der ofte vil være mange usikkerhedskilder, hvoraf nogle kan være mere betydende end parameterusikkerheden.

I den optimale usikkerhedsvurdering er der altså to trin:

1. Identificering, karakterisering og prioritering af usikkerhedskilder.
2. Belysning af betydningen af usikkerhedskilderne (propagering af usikkerheden).

Der findes ingen formaliseret standard metode til identificering og prioritering af usikkerheden, og ofte vil den største udfordring derfor ligge i dette punkt. En nødvendig forudsætning for at få alle usikkerhedsaspekter identificeret er først og fremmest, at usikkerhedsaspektet inddrages løbende gennem hele modelstudiet, således at alle beslutninger ses i et usikkerhedsperspektiv. I de fleste projekter erkendes usikkerheden gennem skriftlige formuleringer som *...kunne tyde på...*, *...sandsynligvis...*, *...formentligt...* etc. En af de store udfordringer ligger i at "fange" disse formuleringer og forsøge at vurdere betydningerne så de kan prioriteres, se næste afsnit. Selve belysningen af betydningen af usikkerheden udføres ofte efter eller i forbindelse med de afsluttende model-simuleringer, hvor modellen benyttes til at propagere usikkerheden, f.eks. i form af en følsomhedsanalyse, anvendelse af multiple model simulering eller en stokastisk metode som Monte Carlo simulering. Selve propagering af usikkerheden til modelresultaterne handler i høj grad om at udvælge en egnet metode som beskrevet i afsnit 19.5.3.

19.5.2 Identificering og prioritering af usikkerhed

I projektførelsen fremkommer der ofte usikkerhedsbetragtninger, f.eks. i forbindelse med databehandling eller tolkning af den geologiske model. Men dette er oftest som relativt vage formuleringer omkring usikkerheden og har kun mindre fokus i et længere skriftligt materiale, såsom rapporter og notater. Der er derfor stor risiko for at disse usikkerhedsbetragtninger glemmes og deres betydning følgelig ikke forsøges kvantificeret. Der er således behov for en metode til at ekstrahere usikkerhedsbetragtningerne og gøre dem synlige på en måde der giver overblik og kan lede til en prioritering samt forslag til håndtering. En velegnet metode hertil kan være anvendelsen af en usikkerhedsmatrix, hvor de identificerede usikkerhedskilder listes og prioriteres. Et simpelt tilfælde herpå er givet i tabel 19.1, med forklarende tekst i tabel 19.2.

Tabel 19.1 Eksempel på en usikkerhedsmatrice

Kilde		Usik.grad/ dækning	Vægt	Effekt	Redu- cerbar	Kvantifi- cerbar	Tiltag	Bemærkninger
D A T A	Potentiale		<i>lille</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>			
	Afstrømning		<i>middel</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>			
	Geologi		<i>stor</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>			
M O D E L	input data							
	Grundvandsdannelse		<i>middel</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>			
	Konceptuel model							
	Geologi		<i>stor</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>			
	Processer		<i>middel</i>	<i>stor</i>	<i>middel</i>			
MANAG EMENT SCENA RIER	Rand		<i>middel</i>	<i>lille</i>	<i>lille</i>			
	Kode		<i>lille</i>	<i>lille</i>	<i>lille</i>			
	Politiske forhold		<i>middel</i>	<i>lille</i>	<i>lille</i>			
	Fremtidige forhold							
SCENARIER	Indvindingsbehov		<i>middel</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>			
	Klima		<i>stor</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>			
	Forureningsbelastning		<i>middel</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>			

Når en usikkerhedskilde er identificeret og indtastet i usikkerhedsmatricen gives en vurdering af betydningen og vægten af denne og hermed effekten. Denne vurdering kan enten foregå ved verbal differentiering såsom, *stor*, *middel* og *lille* eller ved tildeling af en numerisk værdi, hvor værdierne f.eks. kan fastsættes som angivet i tabel 19.3. Scoren for første kolonne af tabel 19.3 er delt op i usikkerhedsgrad og dækning, da betydningen af disse to er forskellige. Under vægt kan der evt. tages hensyn til både betydningen af usikkerheden på modelresultatet og vigtigheden af at være korrekt. Med sidstnævnte menes en vurdering af betydningen af den beslutning der træffes (bl.a. på baggrund af modelresultatet). Vil en forkert beslutning f.eks. føre til en fatal situation, der ikke kan udbedres eller er ekstremt bekosteligt at udbedre, eller er det mindre kritisk. Med "modelresultatet" menes der det modelresultat som modellen primært er sat op for at besvare.

Tabel 19.2 Beskrivelse af kolonner i usikkerhedsmatricen (tabel 19.1)

Kilde	Her angives kilden til usikkerhed
Usik.grad/ dækning	Usik.grad er graden af usikkerhed knyttet til usikkerhedskilden, dvs. er der stor eller lille usikkerhed omkring variabelen. Dækning er primært relevant at vurdere i forhold til tilgængeligheden af data, hvor kvalitet og kvantitet (dækning) af data er betydende for hvor godt modelresultat, der kan forventes.
Vægt	Er hvor betydende faktoren er for modelresultatet
Effekt	Er usikkerhedsgrad x vægt, altså en risikovurdering
Reducerbar	Henfører til om det er muligt at reducere usikkerheden, f.eks. gennem litteratur studier eller supplerende undersøgelser.
Kvantificerbar	Referere til om det er muligt at anvende en metode til at kvantificere usikkerheden, herunder om der er tilstrækkelig information omkring variabelen (f.eks. observationer) til at metoden kan anvendes.
Tiltag	Her vurderes om der skal foretages yderligere tiltag i forbindelse med usikkerhedskilden og i givet fald hvilke. Dette indebærer eksempelvis forslag om ekstra undersøgelser, metode til kvantificering af usikkerhed eller om det kun er muligt at give en kvalitativ beskrivelse af usikkerheden.
Bemærkninger	Her kan angives korte bemærkninger/kommentarer der giver en præcisering af usikkerhedskilden. Specielt nyttig hvis usikkerhedsmatricen anvendes som en dialog platform. Her kan evt. også referes til en rapport hvor usikkerheden er beskrevet mere detaljeret.

Tabel 19.3 Eksempel på numerisk evaluering af usikkerhed og vægt

Score	1	2	3	4	5
Usikkerhedsgrad	Variablen er for praktiske forhold sikkert bestemt, dvs. ingen usikkerhed	Variablen er godt bestemt men erkendt usikker	Moderat usikkerhed (variationskoefficient 1)	Stor usikkerhed. (variationskoefficient >> 1)	Størrelsen af variabelen er total ukendt
Dækning	Ekstra data i rum/tid vil ikke tilføje ny information	En god dækning, men enkelte huller i rum/tid	Åbenlyse huller i datasæt for fokusområdet, men tilstrækkelig til opnåelse af meningsfuldt resultat	Åbenlyse huller i kritiske områder. Modeljob vil være tydeligt påvirket	Data dækning er utilstrækkelig for det ønskede modeljob
Vægt	Usikkerheden har ikke betydning for modelresultatet	Usikkerheden har mindre betydning for modelresultatet.	Usikkerheden har mindre betydning for modelresultatet. Vigtigheden af at være korrekt er stor.	Usikkerheden har direkte betydning for modelresultatet	Usikkerheden har direkte betydning for modelresultatet. Vigtigheden af at være korrekt er stor.

Når usikkerhedskilder med høj prioritet (stor effekt) er identificeret, skal der tages stilling til om det er muligt at reducere usikkerheden på variabelen, f.eks. gennem nye undersøgelser. Ligeledes vurderes, om det er muligt at kvantificere usikkerheden, f.eks. ved anvendelse af en af metoderne i afsnit 19.6. I sidste kolonne gives endeligt et forslag til håndtering af usikkerheden. Ved udfyldelse af usikkerhedsmatricen skal der tages hensyn til, hvad formålet og det ønskede præcisionskrav er for modellen. F.eks. vil der ikke være samme krav til data kvalitet/kvantitet for en model til overslagsberegninger af grundvandsressourcen som for en detaljeret stoftransportmodel.

En usikkerhedsmatrix kan anvendes interaktivt under projektførelsen, således at matricen tilføjes nye usikkerhedskilder, i takt med at disse identificeres. I starten vil det ofte kun være muligt med en overordnet vurdering af usikkerheden, men med fremdriften af projektet vil det være muligt at udvide usikkerhedsmatricen ved tilføjelse af nye usikkerhedskilder, og/eller ved en detaljering af de allerede listede usikkerhedskilder, samt en mere nuanceret score, f.eks. som i tabel 19.3.

Gennemføres der reviews i forbindelse med modelopgaven kan usikkerhedsmatricen anvendes som en platform for diskussion omkring usikkerheden. Under det udførte arbejde op til et review møde indsættes relevante usikkerhedskilder i matricen. Ved et review møde, gennemgås de enkelte kilder og usikkerhedsgrad og vægt diskuteres. For kilder med stor betydning opnås der enighed omkring tiltag, hvilket afhænger af om usikkerheden kan reduceres og i givet fald hvordan og om det er økonomisk rentabelt, eller om det er muligt at give en god karakterisering af usikkerheden og det besluttet først at lave en statistisk usikkerhedsanalyse, før der tages stilling til om der skal indhentes flere data. Det kan også være at usikkerheden hverken kan reduceres eller kvantificeres, hvorfor der kun kan gives en ekspert vurdering, der dokumenteres verbalt i den endelige modelrapport. Endelig vil der være tilfælde, hvor det besluttet ikke at beskæftige sig mere med en usikkerhedskilde, enten fordi den vurderes ubetydelig eller fordi det ikke er muligt at give en meningsfuld vurdering af usikkerhedens størrelse eller effekten heraf. Disse tilfælde skal ligeledes dokumenteres, så det er gennemskueligt for såvel de involverede parter som tredje part, hvilke usikkerhedskilder der er overvejet, hvilke der er inddraget i en usikkerhedsvurdering og hvilke usikkerhedskilder der bevidst er udeladt fra vurderingen.

19.5.3 Kvantificering af usikkerhed

Med fokus på usikkerhedsaspektet gennem hele projektførelsen vil man erkende, at der optræder mange usikkerhedskilder og af meget varierende karakter. På grund af deres forskellighed vil det ikke være muligt at kvantificere samtlige usikkerheder med én og samme metode, og der er derfor behov for en suite af forskellige metoder, hvorfra der kan vælges en egnet metode. Hvilken metode

der er egnet afhænger af vores kendskab til usikkerheden, eller vores tillid til vores viden om usikkerheden. I tabel 19.4 er der givet et bud på hvilke typer af usikkerhedsvurdering der kan anvendes i forbindelse med typiske usikkerhedskilder, når usikkerheden karakteriseres som beskrevet i afsnit 19.2. I de tilfælde hvor det er muligt med en fuldstændig statistisk karakterisering af usikkerheden (*Statistisk usikkerhed*) er det muligt at anvende de statistiske/stokastiske metoder, såsom FejlOphobning (FO) for simple relationer, FølsomhedsAnalyse (FA) eller den mere detaljerede Monte Carlo Simuleringer (MC). Er der tale om opbygningen af den geologiske model vil det endvidere være muligt at anvende T-PROGS når der kan gives en statistisk karakterisering af usikkerheden. I nogle tilfælde kan statistikken ikke udledes direkte fra empiriske data, hvorfor det er nødvendigt at give en Ekspert Vurdering (EV) af eksempelvis udfaldsrummet eller en fordelingsfunktion. Ved *Scenario usikkerhed* er udfaldsrummet kendt, eller kan vurderes med rimelig sikkerhed, hvorimod sandsynlighederne er ukendte. Her er det altså ikke muligt at anvende de statistiske metoder (FO og MC). Er der tale om den konceptuelle model vil der kunne opstilles forskellige alternative modeller Multiple Model Simulering (MMS). Det vil også være muligt at anvende GLUE metoden, skønt dette ikke er set til dato. I forbindelse med parameterusikkerhed vil det være muligt at anvende de InverseRoutiner (IR) når vi blot kan afgrænse parameterintervallet (herefter beregner metoderne selv den nødvendige statistik). Ved *Erkendt uvidenhed* er det ikke muligt at give en absolut kvantificering af usikkerheden og dermed heller ikke betydningen af usikkerheden. I disse tilfælde kan usikkerheden kun formidles verbalt ved en kvalitativ vurdering baseret på en Ekspert Vurdering.

Tabel 19.4 Oversigt over metoder der kan anvendes til vurdering af usikkerhedens betydning afhængig af niveau for usikkerheden.

Usikkerhedskilde		Karakterisering af usikkerhed		
		Statistisk usikkerhed	Scenario usikkerhed	Erkendt uvidenhed
Data	System data	FO, EV, MC, FA	EV, FO	EV
	Drivende variable	FO, EV, MC, FA	EV, FO	EV
Model	Konceptuel model	EV, FA, MC, T-PROGS	EV, MMS, GLUE	EV
	Parametre	EV, MC, FA	EV, FO, GLUE, IR	EV
Management scenarier		EV, MC, FA	EV, FO, MMS	EV

- FO : FejlOphobning (afsnit 19.6.1)
- MC : Monte Carlo simuleringer (afsnit 19.6.2)
- GLUE : Generalized Likelihood Uncertainty Estimation (afsnit 19.6.3)
- IR : Inverse Routiner (afsnit 19.6.4, 19.6.5 og kapitel 14)
- T-PROGS : Transition Probabilities (afsnit 19.6.6)
- FA : Følsomheds Analyse (afsnit 19.6.7)
- MMS : Multiple Model Simulering (afsnit 19.6.8)
- EV : Ekspert Vurdering (afsnit 19.6.9)

19.5.4 Usikkerhedsstrategi

Usikkerhed vil typisk få en særlig behandling specielle steder i et projekt. Første gang er i *projektstarten* hvor formålet, nøjagtighedskravene og hele modelleringsstrategien fastlægges. Her er det specielt vigtigt at fokusere på anvendelsen af modellen, er fokus f.eks. ressource opgørelse, overflade-/grundvandsinteraktion, stoftransport, samt hvilke nøjagtighedskriterier der skal stilles til modellen. Hvilke processer modellen skal simulere vil være bestemmende for hvilke usikkerhedskilder, der vil influere på modelresultaterne og i hvilken grad. Samtidig vil de opstillede nøjagtighedskrav diktere, hvor store ressourcer der skal allokeres i et forsøg på om muligt at reducere usikkerheden og kvantificere den ikke reducerbare usikkerhed. I denne fase er det derfor vigtigt at

nøjagtighedskriterierne overvejes seriøst, da der skal være overensstemmelse mellem de opstillede nøjagtighedskriterier, og de ressourcer der er villighed til at allokere. I denne indledende fase er det ligeledes vigtigt, at de forskellige aktører (vandressourceforvalter, modellør og interessenter) mødes og bliver enige om hvilke usikkerhedskilder, der er involveret, og hvilke der har størst betydning. Dette er ikke en decideret teknisk vurdering i forbindelse med modelanvendelsen, men er en vigtig øvelse i hele beslutningsprocessen, i tilfælde hvor interessenter kan blive direkte berørt af de beslutninger der måtte blive truffet enten helt eller delvist på baggrund af modelsimuleringerne. Ved projektstart drejer det sig således om at få et overblik over hvilke usikkerhedskilder, der kan tænkes at optræde under modelleringsarbejdet, og få disse prioriteret, så der i modelleringen fokuseres på de områder, hvor der er enighed om, at modelstudiet bedst muligt kan hjælpe til at reducere usikkerheder af betydning for beslutningsprocessen. Endelig gælder det om at få denne prioriterede liste "ført til protokol". Anvendes usikkerhedsmatricen vil det i dette indledende step oftest kun være mulig med en overordnet udfyldelse, som eksemplet i tabel 19.1.

I forbindelse med opstillingen af den *konceptuelle model* vil der typisk være flere usikkerhedsaspekter, ikke mindst tolkningen af den hydrogeologiske model. Alt efter områdets geologiske dannelseshistorie vil der være forskellige usikkerhedsaspekter, såsom meget kompleks geologi i randmoræne områder eller dybe begravede dale. Afhængig af den aktuelle model udvides usikkerhedsmatricen med de relevante punkter, et eksempel herpå er givet i tabel 19.5. Under opstillingen af den *sted-specifikke model* vil der ofte optræde usikkerheder i forbindelse med eksempelvis repræsentation af processer og valg af randbetingelser.

Når usikkerhedskilderne er identificeret vil det være muligt at give disse ekstra opmærksomhed i forbindelse med *kalibreringen og valideringen* af modellen. Dvs., med de identificerede usikkerheder in mente kan der designes nogle ekstra model simuleringer til at vurdere anvendeligheden og troværdigheden af den opstillede model til specifikke typer anvendelser. Det er et skridt oveni de analyser modellen udsættes for i valideringstestene.

Det sidste led i usikkerhedsvurderingen foretages i forbindelse med de afsluttende *modelsimuleringer*. Usikkerhedsanalysen udføres for de usikkerhedskilder, der er identificeret som de potentielt mest betydende. Den egnede metodik udvælges som beskrevet i afsnit 19.5.3. Mest sandsynligt vil det være, at der på dette tidspunkt er identificeret flere usikkerhedskilder, og det vil næppe være muligt at kvantificere alle usikkerhedsbidrag vha. en enkelt metode. Propageringen af usikkerhederne til modelresultatet vil derfor ofte betyde anvendelse af flere metoder, enten anvendt parallelt eller i kombination.

Tabel 19.5 Eksempel på en detaljeret usikkerhedsmatrice i forbindelse med opstilling af en grundvandsmodel.

Kilde			Usik.grad/ dækning	Vægt	Effekt	Redu- ktion
	*					
	*					
M O D E L	input data					
		Grundvands- dannelse	Størrelse			
			distribuering			
			tidslig opløsning			
		Indvindinger	størrelse			
			tidslig opløsning			
		Hydrogeologi				
		UZ	Homogenitet			
		Lag2 ML	Kontinuitet			
			Homogenitet			
		Lag3 sand	Kontinuitet			
			Homogenitet			
		*	*			
		*	*			
		Danien	Sprækker			
			Forkastninger			
			Erosionsdal			
			Homogenitet			
		Processbeskrivelse	Kontinuitet			
			Geokemi			
		Nitrat reduktion				
		*				
	*					
	Parametre					
		Parameterisering (zoner)				
	Parameter værdier	Hydr. ledevne				
		vandl. lækage				
		Magasintal				
		Geokemisk				
	Rand					
	Ydre rand(e)					
		*				

19.6 METODER TIL VURDERING AF USIKKERHEDENS BETYDNING

Som beskrevet ovenfor eksisterer der mange forskellige usikkerhedskilder af meget varierende karakter, og til trods for at nogle usikkerhedsbidrag vil kunne reduceres vil det aldrig være muligt at eliminere dem alle. Til vurdering af usikkerhedernes betydning for modelresultaterne er det derfor nødvendigt, at have forskellige metoder til rådighed, hvorfra den optimale metode kan vælges afhængig af hvor usikkerheden optræder, hvilken kendskab der er til usikkerheden samt årsagen til usikkerheden, dvs. usikkerhedens lokalitet, niveau og natur jf. afsnit 19.2. I de efterfølgende afsnit gives en kort præsentation af grundidéen bag udvalgte metoder til usikkerhedsvurdering. For en mere detaljeret gennemgang af metoderne henvises der til litteraturen. Til nærværende kapitel er der hentet generel inspiration i to dokumenter *RIVM/MNP Guidance for Uncertainty Assessment and Communication: Tool Catalogue for Uncertainty Assessment* (Sluijs et al., 2004) og *Harmoni-CA Guidance, Uncertainty Analysis* (Refsgaard et al., 2004).

19.6.1 Fejlphobning

Fejlphobningsloven anvendes til en statistisk kvantificering af usikkerheden ved simple relationer. Hvis usikkerheden på en given størrelse skyldes usikkerhedsbidrag fra flere led kan den samlede usikkerhed beregnes efter fejlphobningsloven. Metoden anvendes oftest i forbindelse med estimering af den del af usikkerheden der er relateret til input data.

Udførelse: Regler for typiske regneoperationer er givet i boks 1. I kapitel 12 er additionsreglen eksempelvis anvendt til at estimere den totale usikkerhed på pejleobservationerne.

Addition og subtraktion: $z = x + y + \dots$ eller $z = x - y - \dots$

$$\sigma_z = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \dots}$$

Multiplikation med en konstant: $z = cx$

$$\sigma_z = c\sigma_x$$

Multiplikation eller division: $z = xy$ eller $z = x/y$

$$\frac{\sigma_z}{z} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2 + \dots}$$

Boks 1 Regler for fejlphobning for typisk anvendte regneoperationer

Fordele:

- Nem at forstå og simpel at udføre (kan udføres på en almindelig lommeregner eller i standard regneark)

Ulemper:

- Kan kun udføres for meget simple relationer
- Begrænset gyldighed.
 - Usikkerheden skal være relativt lille, dvs. variationskoefficienten (standard afvigelsen divideret med middelværdien) skal være mindre end ca. 0.3.
 - De enkelte usikkerhedsbidrag skal følge en normal fordeling

19.6.2 Monte Carlo

Monte Carlo simuleringer er en statistisk numerisk metode, der har til formål at kvantificere usikkerheden på modelresultaterne som funktion af usikkerheden på input og/eller parameterværdier. Metoden tilhører gruppen af stokastiske metode, hvor Monte Carlo metoden er den mest udbredte specielt i forbindelse med rådgivningsopgaver. Grundidéen i de stokastiske metoder er at de indgående størrelser (stokastiske parametre) ikke præsenteres som en eksakt værdi, men derimod et interval, angivet ved en middelværdi og en spredning om denne, samt en sandsynlighedsfordeling indenfor intervallet (f.eks. normal eller lognormal fordeling). Monte Carlo simuleringer udføres ved, at der for hver af de stokastiske parametre "trækkes" (på engelsk: *samples*) en værdi, der ligger indenfor det definerede interval for denne parameter. Herefter foretages en almindelig modelkørsel, og der trækkes en ny parameterværdi for de stokastiske parametre efterfulgt af endnu en modelkørsel. Dette gentages "mange" gange, på en måde der tilgodeser sandsynlighedsfordelingen for de enkelte stokastiske parametre, dvs. der trækkes flest værdier i den del af intervallet hvor parameterværdien har en stor sandsynlighed. Hver modelkørsel kaldes en "realisation" og samtlige realisationer benævnes et "ensemble". Ved en efterfølgende statistisk analyse af samtlige realisationer kan der f.eks. beregnes middel samt standard afvigelse for ensemblet. Modelresultaterne kan således præsenteres som en middelværdi samt et sandsynligheds interval.

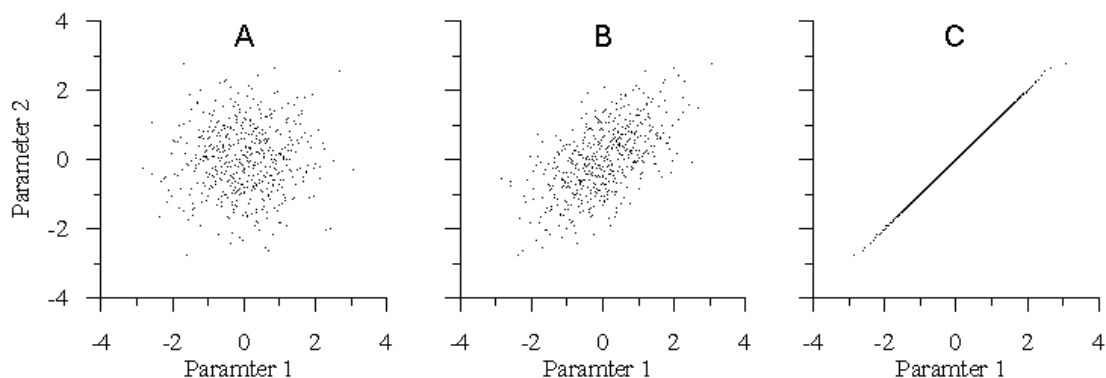
Standard Monte Carlo simuleringer understøttes af mange af de kommercielle GUIs, der er på markedet i dag, hvorved filopsætning, udførelse af de stokastiske simuleringer samt den efterfølgende databehandling bliver en overkommelig opgave. For en standard Monte Carlo simulering ligger den største ressourcemæssige post således i CPU-tid, dvs. den tid der er nødvendig for at eksekvere de mange modelkørsler. I tilfælde hvor den anvendte GUI ikke understøtter Monte Carlo simuleringer eller hvis der er behov for ikke-standard simuleringer kan der downloades nogle kommercielle software packages f.eks. <http://www.palisade.com> og http://www.decisioneering.com/crystal_ball der begge er integrerede microsoft excel add ins og kan anvendes til sampling uden det store forhåndskendskab til teorien. Der findes også tilgængelige freeware som SIMLAB <http://www.jrc.cec.eu.int/uasa/prj-sa-soft.asp> (programmet bliver muligvis gjort kommerciel på et tidspunkt, p.t. kræver det blot at man rekvirere en gratis licens kode).

Udførelse: Monte Carlo simuleringer består af flere af følgende delopgaver

- Identificering af parametre der skal indgå i Monte Carlo analysen (stokastiske parametre)
- Statistisk karakterisering af de stokastiske parametre
- Trækning (sampling) af gyldige parameterkombinationer
- Modelkørsler
- Statistisk efterbehandling af modelkørslerne

Nedenstående diskuteres nogle af de punkter, der specielt kræver opmærksomhed i forbindelse med afvikling og analyse af Monte Carlo simuleringer.

Udvælgelse af parametre I forbindelse med kalibrering er det anbefalet at starte med en udvælgelse af hvilke parametre, der skal indgå i kalibreringen. Samme strategi kan evt. vælges i forbindelse med en Monte Carlo simulering så kun følsomme parametre medtages som stokastiske. Dette er der dog potentielt en stor risiko ved. At en parameter ikke er følsom i forbindelse med en optimering betyder jo blot at parameteren ikke ændrer modelresultatet væsentligt for de typer af observationer vi har til rådighed for vores kalibrering, samt deres tidlige og/eller rumlige placeringen. En lille følsomhed kan derfor eksempelvis skyldes, at en K-værdi repræsenterer en zone med ingen eller kun meget få observationer. Påvirker zonen endvidere ikke de øvrige K-zoner vil denne K-værdi have lille følsomhed i kalibreringen. K-værdien har altså lille betydning på resultatet i forhold til de tilgængelige observationer, men kan godt have stor betydning for modelresultatet. Dette taler altså for at medtage alle parametre, der forventes at have en effekt på modelresultatet. Under udvælgelse af de stokastiske parametre skal der tillige tages hensyn til en evt. parameterkorrelation. Korrelationen betyder, at der er en indbyrdes afhængighed mellem parametrene, hvorfor disse ikke kan trækkes uafhængigt. Parameterkorrelationer kan teoretisk estimeres på baggrund af feltdata, men dette kræver et stort datamateriale for at få meningsfulde værdier, hvorfor det i praksis kun sjældent er en farbar vej. Er der anvendt invers optimering til kalibrering vil den endelige kalibreringsstatistik fra den inverse rutine som regel også indeholde en korrelationsmatrice, der angiver parametrene indbyrdes korrelation, se kapitel 14. Betydningen af parameterkorrelation er illustreret på figur 19.3a-c for to parametre der er samlet fra en normalfordeling med henholdsvis: ingen korrelation (19.3a) positiv korrelation på 0.5 (19.3b) og en perfekt korrelation, dvs. en korrelation på 1.0 (19.3c). Som det fremkommer af figuren kan der samples frit fra hele parameterrummet i tilfælde af ukorrelerede parametre, selvfølgelig med en større hyppighed hvor parametrene sandsynligheder er størst. I tilfælde af korrelerede parametre kan der derimod ikke trækkes fra hele parameterrummet. Hvis der i tilfælde af perfekt korrelation (figur 19.3.c) f.eks. trækkes en værdi på 1.0 for parameter 1, vil værdien af parameter 2 automatisk være fastlagt til også at antage værdien 1.0. Med en korrelation på 0.5 vil der være lagt mindre bånd på parameter 2, som i tilfældet med parameter 1 lig 1.0 vil parameter 2 approksimativt kunne variere indenfor intervallet [-1; 2]. Har man udvalgt en stokastisk parameter til Monte Carlo simuleringerne, der er korreleret med én eller flere af de øvrige modelparameter, er det således principielt nødvendigt også at medtage disse parametre og specificere deres indbyrdes korrelation.



Figur 19.3 Betydning af parameterkorrelation. Sampling af to normalfordelte parametre uden indbyrdes korrelation (A) og korrelationer på 0.5 (B) og 1.0 (C)

Statistisk karakterisering. For samtlige stokastiske parametre skal der specificeres en sandsynlighedsfunktion, hvilket ikke er nogen trivial opgave. Den mest intuitive metode er ved analyse af feltdata. Har man tilstrækkeligt med feltdata (f.eks. K-data fra slugtests) kan disse analyseres og en sandsynlighedsfunktion med tilhørende middelværdi og spredning kan opstilles. Dette kræver imidlertid et stort datamateriale, hvilket kun sjældent er til rådighed. Selv ved tilstrækkeligt med data vil der være problemer med metoden i form af skaleringsproblemer. Er den estimerede K-værdi eksempelvis repræsentativ for den anvendte skala i modellen (gridskala/zonering)? Er det ikke muligt at anskaffe tilstrækkeligt med data kan "ekspert vurdering" være et alternativ, altså en subjektiv vurdering fra folk med stor erfaring. Oplagte ulemper i denne forbindelse er, at denne vurdering netop er subjektiv og derfor reflekterer den enkelte "eksperts" vurdering af en given størrelse. Nogle vil eksempelvis have stor tiltro til en metode og dennes repræsentativitet (f.eks. slug tests) og derfor tildele de estimerede værdier en lille usikkerhed, omvendt vil andre have lille tiltro og følgelig tildele en stor usikkerhed til estimererne. Hvis der er anvendt invers optimering kan et tredje alternativ være at anvende de konfidensintervaller, der beregnes som del af den endelige kalibreringsstatistik i stort set alle inverse optimeringsrutiner. Af væsentlige fordele ved denne metode skal fremhæves, at parametrenes konfidensintervaller her er beregnet på basis af den specifikke model setup, se afsnit 14.5 om parameterusikkerhed. Dvs. konfidensintervallerne er et udtryk for usikkerheden på de effektive modelparametre givet den anvendte modelstruktur og de tilgængelige observationsdata. Da konfidensintervallerne beregnes for de effektive parametre er der altså ikke noget skaleringsproblem og da det er beregnede størrelser er estimererne objektive. Der er imidlertid nogle antagelser, der skal være overholdt for at de estimerede konfidensintervaller er korrekte. Dette er antagelser omkring residualerne, der ideelt set skal være uafhængige og normalfordelte, og ofte en antagelse om linearitet. Hvis disse antagelser ikke er overholdt vil de estimerede konfidensintervaller kun tilnærmelsesvis være korrekte. En anden fordel ved at anvende resultaterne fra den inverse optimering er, at disse værdier allerede foreligger efter endt kalibrering og altså ikke kræve ekstra arbejdsindsats. Er modellen ikke kalibreret inverst, men den anvendte GUI indeholder en rutine for invers optimering, er det som regel en relativt begrænset arbejdsindsats, der skal gøres for at anvende den inverse rutine til at beregne en kalibreringsstatistik, og kræver ikke en egentlig optimering.

Det fremgår således, at det ikke er en trivial opgave at skulle bestemme de statistiske størrelser for en stokastisk parameter, og at det kun sjældent kan lade sig gøre at bestemme disse eksakt. For langt de fleste tilfælde vil det kun være muligt at estimere parameterusikkerhederne ved anvendelse af en invers rutine, men selv her vil der være tale om tilnærmelser. Foruden en middelværdi samt spredning er det nødvendigt at specificere en fordelingsfunktion for de stokastiske parametre. Typiske stokastiske parametre er den hydrauliske ledningsevne og/eller grundvandsdannelsen til det mættede magasin, og for disse to parametertyper antages det som regel at den hydrauliske ledningsevne følger en log-normal fordeling hvorimod grundvandsdannelsen følger en normalfor-

deling. En normalfordeling $N(\alpha, \beta^2)$ siges at have fordelingsparametrene α og β^2 og tæthedsfunktionen er givet ved

$$f(x) = \frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left[\frac{x - \alpha}{\beta}\right]^2\right] \quad (19.1)$$

For en normalfordeling er fordelingsparametrene lig med middelværdien (μ) og variansen (σ) der er den kvadrede standard afvigelse. Tæthedsfunktionen for en lognormal fordeling er givet ved

$$f(x) = \frac{1}{x\beta\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left[\frac{\ln(x) - \alpha}{\beta}\right]^2\right], \quad x > 0 \quad (19.2)$$

En lognormalfordeling $LN(\alpha, \beta^2)$ har ligeledes fordelingsparametrene α og β^2 men relationen mellem fordelingsparametrene og middelværdi samt variansen er i dette tilfælde givet ved

$$\mu = \exp\left[\alpha + \frac{1}{2}\beta^2\right] \quad (19.3)$$

$$\sigma^2 = \exp\left[2\alpha + \beta^2\right] (\exp[\beta^2] - 1) \quad (19.4)$$

Fordelingsparametrene kan følgelig udtrykkes på baggrund af middel og standard afvigelse ved

$$\alpha = \ln[\mu] - \frac{1}{2} \ln\left[\frac{\sigma^2}{\mu^2} + 1\right] \quad (19.5)$$

$$\beta^2 = \ln\left[\frac{\sigma^2}{\mu^2} + 1\right] \quad (19.6)$$

Anvendes data fra en invers optimering kan standardafvigelsen beregnes på baggrund af de opgivene 95% konfidens intervaller.

$$stdev(normal \text{ fordeling}) = \frac{U95 - L95}{2 * 1.96} \quad (19.7)$$

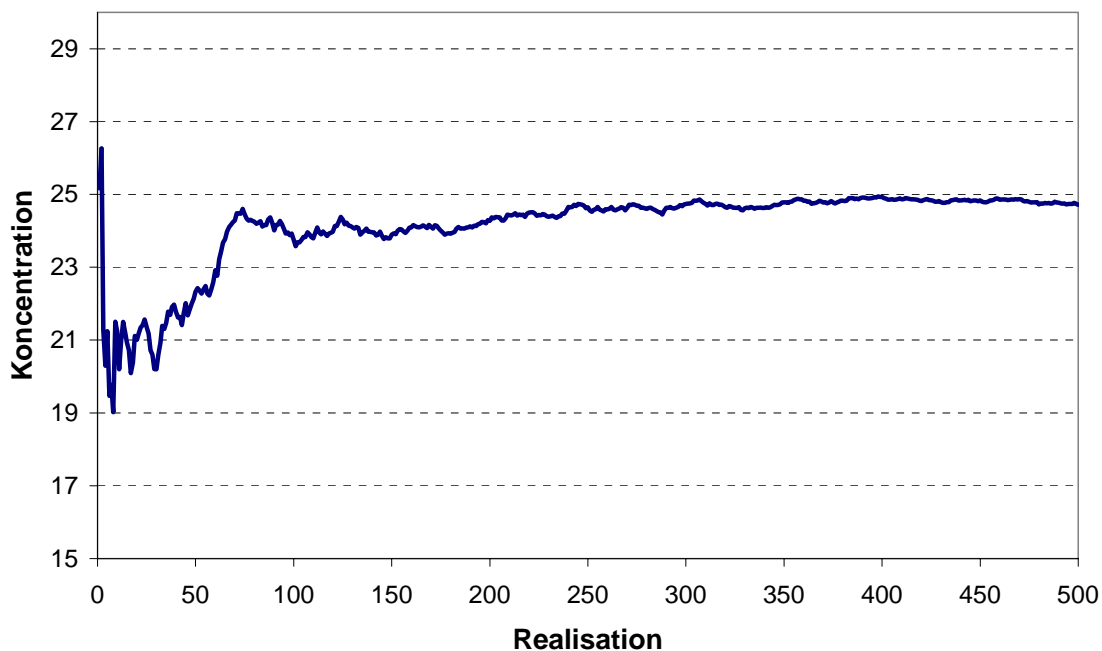
$$stdev(lognormal \text{ fordeling}) = \sqrt{\left(\exp\left[\frac{\ln U95 - \ln L95}{2 * 1.96}\right]^2 - 1\right) mean^2} \quad (19.8)$$

Ved indtastning af de stokastiske parametre i en GUI skal man være omhyggelig mht. hvorledes data skal indtastes, da der er forskel på om middel samt spredning skal angives som "normale" værdier eller logtransformerede værdier. Endvidere skal man være opmærksom på om det er middelværdi og standard afvigelse der skal indtastes eller om det er sandsynlighedsfunktionens fordelingsparametre.

Sampling En hyppig metode til udvælgelse af parameterværdierne er ved tilfældig trækning ("random draw"), dvs. parameterværdierne trækkes tilfældigt indenfor deres respektive intervaller (men tilgodeser fordelingsfunktionen og eventuelle korrelationer mellem parametrene). Da parameterværdierne sandsynlighed aftager mod interval endepunkterne, skal der derfor trækkes mange gange for at få endepunkterne repræsenteret. Antallet af nødvendige trækninger øges endvidere når der indgår flere parametre, for at sikre at parametrenes fælles fordelingsfunktion (joint probability density function, jpdf) beskrives i tilstrækkelig detalje. Der kan reduceres betydeligt i antallet af nødvendige realisationer ved anvendelse af en mere sofistikeret trækning af parameterværdierne, der benævnes Latin Hypercube sampling, se Helton and Davis (2003) for en detaljeret teknisk gennemgang. Denne metode tilhører en gruppe af stratificerede sampling metoder, og går ud på at opdele udfaldsrummet i intervaller med lige stor sandsynlighed, hvorefter der trækkes lige mange

gange indenfor hvert interval. På denne vis sikres det at der trækkes i hele intervallet (inklusive yderpunkterne) samtidig med at sandsynlighedsfordelingen tilgodeses.

Men selvom der anvendes Latin Hypercube sampling, er det nødvendigt at generere et stort antal af realisationer, for at hele parameterummet (dvs. mulige udfald af parametre og parameter kombinationer) bliver afprøvet. Der kan ikke gives nogen gylden regel for præcist hvor mange realisationer, der er nødvendig. Dette afhænger som tidligere nævnt af antallet af stokastiske parametre, der indgår i analysen, hvor betydende disse parametre er for modelresultatet (parameter følsomhed), og hvor godt sandsynligheden på modelresultaterne ønskes beskrevet. I nogle referencer angives det for Latin Hypercube at antallet af realisationer skal være mindst $3/2$ gange antallet af parametre, men at det typisk er nødvendigt med et langt større antal f.eks. 10 gange antallet af parametre. I forbindelse med grundvandsmodeller vil selv 10 gange antallet af parametre dog ofte være helt utilstrækkelig. Hvorvidt der har været anvendt tilstrækkeligt mange realisationer kan testes efter den udførte Monte Carlo simulering, ved at teste konvergens af de statistiske størrelser for ensemblet (dvs. alle realisationerne) mht. et givent model output. Er man eksempelvis interesseret i koncentrationsniveauet i en boring kan ensemble middelværdien af denne koncentration udregnes successivt, dvs. efter første realisation er middelværdien lig den simulerede værdi, efter anden realisation er middelværdien middel af de to første realisationer og så fremdeles. I starten vil middelværdien variere kraftigt, da hver ny værdi vil have stor vægt ved udregning af middelværdien, men efter tilstrækkeligt mange realisationer vil middelværdien kun ændres minimal ved addering af endnu en værdi, se figur 19.3 for eksempel. Når middelværdien ikke ændres væsentligt ved addering af nye værdier siges det, at ensemblet har nået konvergens mht. middelværdien.



Figur 19.4 Udvikling af ensemble middelværdi for simuleret koncentration.

At det nødvendige antal modelkørsler generelt er proportionalt med antallet af stokastiske parametre, taler for en udvælgelse af hvilke parametre, der skal indgå i analysen, og altså ikke som anbefalet tidligere, at inkludere næsten samtlige parametre. Men hvis en parameter ikke influerer på modelresultatet vil det heller ikke have indflydelse på konvergensraten og således ikke kræve flere modelkørsler. Medtages en parameter derfor i Monte Carlo simuleringen, som ikke har betydning for modelresultatet vil det altså ikke øge antallet af nødvendige modelkørsler. Udelades der-

imod en parameter fordi den fejlagtig antages at være uden betydning, vil dette have betydning for usikkerhedsanalysen. Det anbefales derfor, at parametre fravælges med stor forsigtighed.

Nogle GUIs, der tilbyder faciliteter for Monte Carlo simuleringer, giver ikke mulighed for specificering af en eventuel parameterkorrelation. Som det ses af figur 19.3 så betyder en evt. parameterkorrelation, at der ikke kan trækkes fra hele parameterrummet. Tilgodeses korrelationen ikke ved sampling betyder dette, at der vil samples parameterkombinationer, der ikke er gyldige pga. den indbyrdes korrelation, hvilket generelt vil føre til overestimering af usikkerheden. Det er imidlertid meget svært, om end ikke umuligt, at estimere en troværdig parameterkorrelation. Kun i meget specielle tilfælde vil det være muligt at estimere korrelationen på baggrund af observerede data, og det vil derfor være nærliggende at anvende korrelationerne estimeret vha. en invers rutine. Disse estimater er dog relativt usikre pga. ikke-linearitet som beskrevet i Hill & Østerby (2003). Hvorvidt det er acceptabelt med en antagelse om ikke-korreleerede parametre afhænger af hvor følsom modelresultaterne er mht. de evt. korreleerede parametre, og vil således variere fra sag til sag.

Fordele: Der er flere grunde til at Monte Carlo metoden er blevet den hyppigst anvendte metode, disse er bl.a.

- Er intuitiv let at forstå
- Ingen krav til fordelingsfunktionen for de stokastiske parametre. Dvs. det er ikke en forudsætning for metoden, at alle de stokastiske parametre følger en bestemt fordelingsfunktion endside den samme fordelingsfunktion.
- Det er muligt at tage højde for indbyrdes korrelation mellem de stokastiske parametre.
- Kan anvendes for alle variable blot denne kan kvantificeres statistisk. Monte Carlo simulering anvendes hyppigst i forbindelse med analyse af usikkerheden på de hydrauliske parametre eller input data, men kan i princippet omfatte eksempelvis randbetingelser, hvis der kan opnås en statisk kvantificering af denne.

Ulemper:

- Kræver afvikling af mange modelsimuleringer for at opnå et meningsfuldt resultat. Dette skyldes, at hele udfaldsrummet for de stokastiske parametre skal undersøges (se nedenfor).
- Der skal specificeres en sandsynlighedsfunktion for hver af de stokastiske parametre.

19.6.3 *Generalized Likelihood Uncertainty Estimation methodology, GLUE*

GLUE (Beven og Binley, 1992) minder i nogen grad om Monte Carlo simuleringer, idet usikkerheden på de usikre variable forplantes til modelresultaterne ved afvikling af et stort antal modelkørsler. De to metoder er dog fundamental forskellige i den grundlæggende filosofi. I GLUE afvises antagelsen om, at der findes ét optimalt parametersæt, og det accepteres at der findes flere (ofte mange) forskellige parameterkombinationer, der resulterer i lige gode fit til observationerne (benævnt equifinality problemet). I GLUE går øvelsen derfor ud på at finde de parameterkombinationer, der tilfredsstiller nogle opstillede krav til model performancen. Modsat Monte Carlo metoden er et kendskab til fordelingsfunktionerne ikke en nødvendig forudsætning for anvendelsen af GLUE. Tværtimod defineres fordelingsfunktionerne fra start (prior statistics) ofte som brede uniforme funktioner, der afspejler at vi ofte ikke har kendskab eller kun meget begrænset kendskab til fordelingsfunktionerne. Der er altså ikke på forhånd gjort antagelser om hvilke parameterkombinationer der mest sandsynlige, eller slet ikke sandsynlig. I GLUE vurderes sandsynligheden for en given parameterkombination ved fastsættelse af en eller flere likelihood funktion(er) der udtrykker sandsynligheden for at en given parameterkombination kan være "korrekt". I den mest simple form kan likelihood funktionen f.eks. defineres på baggrund af de beregnede residualer, hvor det fastsættes, at alle parameterkombinationer der giver en summeret kvadratafvigelse sum der er mindre end et givent niveau accepteres som mulige parameterkombinationer ("behavioral models"), og øvrige kombinationer forkastes. Usikkerheden på parametrene kan efterfølgende estimeres på baggrund af de accepterede parameterkombinationer.

Udførelse: GLUE metoden er kun understøttet af ganske få GUIs, men der kan downloades et program til analyse af modelkørsler efter GLUE princippet på <http://www.es.lancs.ac.uk/hfdg/glue.html>, hvor der også kan findes lidt ekstra information.

Fordele: Et tiltalende element i GLUE er, at det accepteres at der kan være mange parameterkombinationer, der kan føre til lige gode fit i data, hvorfor der ikke eksisterer én optimal parameterkombination. I praksis har det den fordel at metoden ikke kræver kendskab til en fordelingsfunktion for parameteren, hvilket, som beskrevet under Monte Carlo metoden, kan være meget svært.

Ulemper: En af de væsentligste ulemper ved metoden er at det kræve mange modelkørsler, mange flere end den traditionelle Monte Carlo, hvilket netop skyldes at de usikre parametre tildeles meget brede intervaller og at der ofte anvendes uniforme fordelingsfunktioner. Dette gør at parameterområdet, der kan samples i, er meget stort med mange mulige kombinationer. Det kan derfor være nødvendigt at udføre flere tusinde modelkørsler. En anden ulempe er, at der skal defineres nogle likelihood funktioner. Jo strengere krav der opstilles, jo flere kombinationer vil der blive forkastet, og det accepterede parameterområde indskrænkes. Valget af likelihood funktioner vil således påvirke det endelige resultat mht. de beregnede usikkerhedsintervaller, hvilket også har været diskuteret af bl.a. Christensen (2004). Metoden har primært været anvendt i forbindelse med forskning, og der sker en stadig udvikling af metode.

19.6.4 MODFLOW2000

De fleste af de tilgængelige inversionsrutiner har indbygget procedurer til estimering af usikkerheden på modelsimuleringerne (prediktions analyse, på eng: predictive analysis), dette gælder eksempelvis UCODE (Poeter and Hill, 1998) og optimeringsrutinen indbygget i MODFLOW2000 (Hill et al., 2000) der begge bygger på den samme metodik. Usikkerheden på prediktionerne beregnes semi-analytisk på basis af den beregnede varians-kovarians matrice (ligning 14.14) samt en beregning af hvor følsom prediktionsværdien er overfor ændringer i modelparametrene, dvs. der beregnes en Jacobi matrice som 14.12, hvor prediktionsværdien indsættes som den afhængige variable. Output fra usikkerhedsanalysen kan være enten konfidensintervaller for prediktionsværdierne eller konfidensintervaller for ændringer. Sidstnævnte mulighed betyder at der beregnes en usikkerhed på forskellen mellem en reference situation (f.eks. nuværende forhold) og en scenarie kørsel (f.eks. ændret indvindingsstrategi), fremfor usikkerheden på de absolutte størrelser for scenarie kørslen. Den grundlæggende idé er, at prediktionsværdien opfattes som en observationsværdi, og de statistiske størrelser for prediktionsværdien udregnes som tilfældet er for observationsværdierne under kalibreringen.

Udførelse: Basalt set går det ud på, at få den relevante prediktionsværdi defineret som en observationsværdi. Alt efter den anvendte GUI understøttes muligheden for prediktionsanalysen i forskellig grad, og arbejdet med opsætningen af de nødvendige filer varierer således også. Understøtter den anvendte GUI ikke analyse af usikkerhederne på prediktionsværdierne kan man anvende programmet "MOD-Predict" der kan downloades fra <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow.html> med tilhørende dokumentation. Programmet giver flere muligheder for en usikkerhedsanalyse end dem der er indbygget i MODFLOW2000, og kan anvendes direkte med MODFLOW2000 filer. Endvidere er outputtet fra MOD-PREDICT specielt formateret til en grafisk præsentation af resultaterne.

Fordele:

- Kræver relativt få modelkørsler
- Kræver begrænset user input

Ulemper:

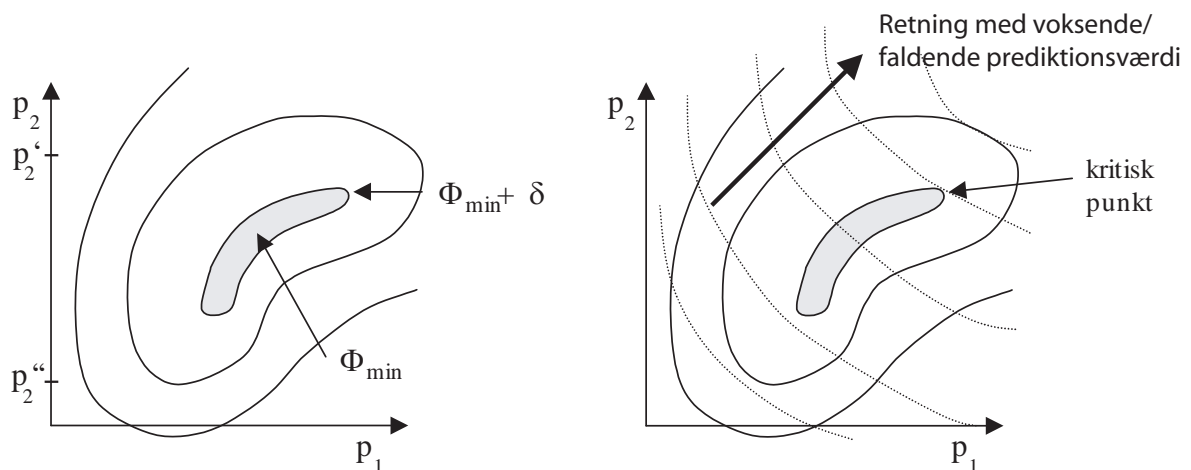
- Den output variabel der ønskes en usikkerhedsvurdering for, skal kunne defineres som en observationsværdi. Metoden er derfor begrænset til output typer der ville kunne anvendes som kalibreringstargets, dvs. potentiale, tidslig ændring i potentiale, afstrømning, udveksling med fastholdt tryk rand og stofkoncentrationer (advektiv transport)
- Konfidensintervallerne for prediktionsværdierne beregnes ud fra en antagelse om model linearitet omkring optimum.

19.6.5 PEST

Metoden i PEST (Doherty, 2004) adskiller sig væsentligt fra den der anvendes i MODFLOW2000. I PEST er den underliggende filosofi, at det interessante er ekstremerne, f.eks. vil det mest interessante i forbindelse med en forureningstrussel ofte være, hvornår det tidligste gennembrud kan forventes samt hvad den maksimale koncentration vil blive. I stedet for at anvende en analytisk løsning, med de uundgåelige antagelser om linearitet, tager PEST afsæt i, at optimere prediktionsværdien, dvs. finde den maksimale eller minimale prediktionsværdi, der er mulig for den givne model. Denne maksimering/minimering bliver dog begrænset ved, at modellen samtidig kræves at være kalibreret på et acceptabelt niveau, defineret på basis af en acceptabel værdi for objektiv funktionen

Udførelse: Analysen udføres ved, at der subjektivt angives hvilken værdi objektiv funktionen maksimalt må antage, for at modellen stadig vurderes at være kalibreret på et acceptabelt niveau. Dette er illustreret på figur 19.5 for et simpelt tilfælde med to parametre, hvor Φ_{min} er minimumsværdien for objektiv funktionen, dvs. værdien for objektiv funktionen for den færdig kalibrerede model, og δ er den subjektive valgte tilvækst i objektiv funktionen, der tillades for at modellen stadig accepteres at være kalibreret. PEST benytter da sin optimeringsalgoritme til at finde den parameter kombination der giver den største (mindste) prediktionsværdi, samtidig med at objektiv funktionen ligger indenfor det skraverede areal $\Phi_{min} + \delta$. Denne parameterkombination benævnes det kritiske punkt.

Er PEST ikke indbygget i den anvendte GUI kan programmet samt manual downloades fra <http://www.sspa.com/pest/index.htm>.



Figur 19.5 Illustration af objektiv funktion i to-dimensionalt parameterum. Til venstre ses optimum (Φ_{min}) og tilladelig værdi af objektiv funktion ($\Phi_{min} + \delta$). På figuren til højre illustrerer de skitserede linier konturer af prediktionsværdien, og det kritiske punkt er angivet. Figureerne er baseret på Doherty (2004).

Fordele:

- Sammenlignet med Monte Carlo og GLUE kræver metoden relativt få modelkørsler. Hvor mange modelkørsler der er nødvendig afhænger af hvor "nemt" det kritiske punkt kan findes, hvilket i de fleste tilfælde er vanskeligere end at finde objektiv funktionens minimum, dvs. optimeringen. Metoden vil altid kræve flere modevalueringer end metoden i MODFLOW2000.
- Det er muligt at få en vurdering af "worst-case", med den anvendte modelstruktur (herunder parameteriseringen) under hensyntagen til, at modellen stadig skal kunne fitte observationsværdierne acceptabelt.
- Kræver begrænset user input
- Er ikke så følsom overfor model linearitet som MODFLOW2000 metoden

Ulemper:

- Der kan kun beregnes usikkerhed for én prediktionsværdi ad gangen. Den parameterkombination der fører til worst-case for et koncentrationsniveau er ikke nødvendigvis den samme, der fører til worst-case i en anden observationsboring.
- Der beregnes ikke statistik for hvor sandsynlig worst-case situationen er
- Den maksimale tilvækst i objektive funktionen (δ) er afgørende for analysen, og denne skal angives subjektivt.

19.6.6 T-PROGS

T-PROGS (Transition PROBability Geostatistical Software) tilhører de stokastiske metoder. Metoden erkender, at vi aldrig vil være istand til at give en deterministisk og fuldstændig beskrivelse af de geologiske forhold, men i bedste fald vil være i stand til at karakterisere heterogeniteten statistisk. Metodens navn refererer til, at man forsøger at beskrive transition probabilities, dvs. sandsynligheden for forskellige hydrofacies overgange (overgangssandsynligheder), f.eks. sandsynligheden for et skift fra "ler" til "sand" over en given afstand i det horisontale eller vertikale plan. Foruden sandsynlighederne tager metoden højde for fysiske parametre, såsom volumenfordeling, altså hvor meget der er af hver facies, og middellængder, der kan være de horisontale middellængder for sandlinser indesluttet i en lerformation eller en middel tykkelse af en enhed. På baggrund af sandsynlighederne genereres forskellige realisationer af mulige hydrogeologiske modeller, der alle tilgodeser sandsynlighederne for skift samt de fysiske parametre, ligesom det sikres, at de rigtige facies optræder, der hvor de er observeret (conditional simulation). Metoden adskiller sig fra de fleste andre stokastiske metoder ved, at det er de geologiske facies der er den stokastiske variable, og ikke de hydrogeologiske karakteristika såsom den hydrauliske ledningsevne. Den stokastiske størrelse opfattes som en diskret størrelse (kategori/ indikator) fremfor en kontinuert fordeling. Realisationerne genereres derfor i T-PROGS ved indikator kriging, der gør det muligt at bevare skarpe afgrænsninger mellem de hydrologiske enheder, og dermed skarpe afgrænsninger i den hydrauliske ledningsevne. Til trods for at metoden blev udviklet midt i 90'erne, findes der kun få eksempler på at metoden har været anvendt i praksis. Nogle GUIs er dog begyndt at understøtte T-PROGS (bl.a. GMS), og der er således chance for at metoden vil blive anvendt mere i fremtiden. Metoden er beskrevet detaljeret i T-PROGS manualen, efter registrering kan denne downloades frit fra <http://www.bossintl.com/products/dpdf/files/ftp/dir/01402/pdf/t-progs.pdf>

$$t_{jk}(h) = \Pr(j \text{ optræder ved } x+h \mid k \text{ optræder ved } x)$$

Udførelse: Metoden kræver en del forarbejde mht. analyse af det geologiske materiale, dette indbefatter eksempelvis en opdeling i kategorier, f.eks. "ler", "sand", "grus", Figur 19.6. Herefter genereres overgangssandsynlighederne der er den betingede sandsynlighed at kategori j optræder på position $x+h$, hvor h er lag afstanden, når kategori k optræder på positionen x . Med overgangssandsynlighederne og de fysiske størrelser som proportioner og middel længder genereres der Markov kæder, ud fra hvilke der kan genereres et ønsket antal realisationer af mulige fordelinger af de geologiske facies. For hver realisation kan der så, som ved Monte Carlo simuleringerne, gennemføres en beregning og resultaterne kan angives som en sandsynlighed fremfor en absolut værdi.

Fordele:

- Metoden gør det muligt at bevare skarpe skel mellem forskellige facies.
- Det er muligt at inddrage geologisk information direkte, eksempelvis ved definering af middellængde, volumenfraktion og overgangssandsynligheder.

Ulemper:



Figur 19.6 Opdeling af kerne i kategorier.

- Metoden understøttes endnu kun af få GUIs.
- Den bagvedliggende matematik er relativ kompliceret. Selvom der anvendes en GUI der gør databehandlingen og generering af realisationer overkommelig, er det nødvendigt med et minimum af forståelse af matematikken.
- Metoden kræver stationaritet, dvs. den geologiske heterogenitet skal være ens i det betragtede område. Dette betyder i praksis at et område dannet under varierende geologiske forhold typisk skal inddeles i forskellige delområder med hver deres overgangssandsynligheder.

19.6.7 Følsomhedsanalyse

Følsomhedsanalyse udføres til at belyse hvor stor betydning én variabel har på modelresultatet. Metoden anvendes ofte i forbindelse med både kalibrering og usikkerhedsvurdering. Under kalibrering anvendes følsomhedsanalyse til at identificere hvilke variable, der har mest indflydelse på modelresultatet, og som man derfor skal koncentrere sig om i kalibreringen. Ved en usikkerhedsvurdering kan man anvende en følsomhedsanalyse, hvis der ikke er tilstrækkelig kendskab til variabelen til en fuldstændig statistisk karakterisering. Måske er det kun muligt at give et realistisk bud på en minimum/maksimumsværdi uden noget kendskab til sandsynlighedsfordelingen. Følsomhedsanalyse har dog også ofte været anvendt som en erstatning for Monte Carlo simuleringerne, da en følsomhedsanalyse ikke er nær så tidskrævende.

Udførelse: Når en følsomhedsanalyse anvendes til belysning af en modelusikkerhed gøres det ofte ved at udvælge nogle få variable i den kalibrerede model. De udvalgte variable er dem, som man enten ved har en stor følsomhed, f.eks. fra erfaringer gjort under kalibreringen, eller som man har en mistanke om vil have en stor betydning, f.eks. en randbetingelse. Der foretages nu en række modelkørsler, hvor de udvalgte variable varieres én ad gangen, og effekten heraf monitoreres ved at observere, hvor meget en given output variabel ændres. Et eksempel kan være en model, der skal give et estimat på grundvandsdannelsen til en bestemt dybde, hvor en følsom variabel i denne forbindelse er nettonedbøren. Har man ikke tilstrækkelig information til en statistisk karakterisering af nettonedbøren, men tilstrækkelig information (f.eks. fra andre projekter) til en vurdering af variationen af nettonedbøren, f.eks. +/- 20%, kan man anvende en følsomhedsanalyse. Udfra en reference situation (der er den kalibrerede model) observeres, hvor meget grundvandsdannelsen ændres når nettonedbøren justeres hhv. 20% op og ned.

En følsomhedsanalyse er en meget nyttig øvelse i forbindelse med kalibrering, da det synliggør hvilke variable (oftest modelparametre) der er mest følsomme, og som man derfor skal koncentrere sig om i forbindelse med kalibreringen. I forbindelse med en usikkerhedsanalyse skal man imidlertid være mere varsom med anvendelse af en følsomhedsanalyse for modelparametrene. Forestiller vi os en simpel model med blot to parametre, vil vi efter en succesfuld kalibrering have fundet punktet Φ_{min} på figur 19.5. Udfører vi nu en følsomhedsanalyse for p_2 ved at ændre værdien til p_2' og p_2'' vil vi i begge tilfælde have flyttet os langt fra den optimale parameterkombination (minimum af objektiv funktionen). Modellen vil derfor ikke længere kunne accepteres som værende kalibreret, og det er altså ikke meningsfuld at observere variationen i model outputtet.

Fordele:

- Kræver meget få ressourcer at udføre, både mht. opsætning af filer, eksekvering og efterfølgende analyse. Nogle GUIs indeholder rutiner specielt skræddersyet til udførelse af følsomhedsanalyser.
- Det er muligt at belyse usikkerheden af enhver type af variabel, f.eks. rand, input data og modelparametre.

Ulemper:

- Der stilles ikke krav mht. en vurdering af, hvor sandsynlig de anvendte parameterverdier er, og dermed hvor sandsynlig outputtet er.
- Ændring af en variable vil potentielt kunne føre til at modellen ikke længere er kalibreret, hvorfor den undersøgte værdi for variabelen må forkastes ligesom den observerede effekt.
- Der kan ikke tages højde for en indbyrdes korrelation mellem parametre.

19.6.8 Multiple Model Simulation

Opstilling af enhver model starter med opstilling af en konceptuel model, dvs. en sammenfatning af vores forståelse af strukturen af det fysiske system, og hvilke processer der er gældende, se også kapitel 3 og 4. Den færdige models evne til at simulere det fysiske system er i høj grad afhængig af, hvor godt vi i første omgang har forstået systemet og repræsenteret det i den numeriske model. En fejlagtig konceptuel model vil ofte have stor betydning for modelresultatet, og usikkerheden i den konceptuelle model er således ofte den mest betydende usikkerhed (f.eks. Neumann & Wierenga, 2003; Højberg & Refsgaard, 2005).

Et velkendt eksempel på usikkerhed i den konceptuelle model indenfor grundvandsmodellering er den geologiske/hydrogeologiske model. Det vil aldrig være muligt, at få en fuldstændig opløsning af de geologiske enheder, hvorfor der skal foretages en tolkning af geologien/hydrogeologien i forbindelse med enhver grundvandsmodellering. Da tolkningen netop går ud på at udfylde "hullerne" i de områder hvor vi *ikke* har kendskab til geologien, vil det være muligt at opstille mange forskellige konceptuelle modeller. Så længe disse alternative konceptuelle modeller er i overensstemmelse med de tilgængelige geologiske og geofysiske data, vil de alle være sandsynlige modeller, som det ikke er muligt at diskriminere mellem. Den eneste mulighed for at belyse betydningen af usikkerheden på den konceptuelle model (også benævnt model struktur), vil være at anvende samtlige troværdige alternative modeller sideløbende. Usikkerhed på den konceptuelle model er ikke begrænset til usikkerheden på hydrogeologien, men omhandler også usikkerheden mht. hvilke processer der foregår i naturen, deres interaktion og hvordan de bedst repræsenteres i den numeriske model.

Udførelse: Den mest ligefremme udførelse er, at lade forskellige personer opstille hver deres model. De alternative modeller, der herved fremkommer, vil da afspejle de enkelte personers konceptuelle forståelse af såvel hydrogeologien og de styrende processer, samt deres vurderinger af hvilke antagelser og simplificeringer, der er acceptable. Opstilling af den konceptuelle model er imidlertid en meget ressourcekrævende proces, og for de fleste modeljob vil det være en uoverkommelig opgave at skulle opstille flere forskellige konceptuelle modeller helt fra bunden. Alternativt kan der under konstruktionen af en konceptuel model fokuseres på usikre forhold, der vurderes at have størst betydning for det endelige modelresultat. Der kan så efterfølgende opstilles alternative modeller, der varierer mht. de usikre forhold. Et eksempel kan være usikkerhed om eksistensen eller udbredelsen af en begravet dal. Der kan her opstilles alternative modeller hhv. med og uden dal eller mht. udformningen af dalen.

I nogle tilfælde vil det være muligt at forkaste én eller flere af de alternative konceptuelle modeller, f.eks. i tilfælde hvor modellen ikke kan simulere grundvandspotentialet acceptabelt ved anvendelse af realistiske parameterværdier. Alternativer, der ikke kan forkastes, må accepteres som mulige løsninger. Det vil ikke være muligt at associere de enkelte alternativer med en absolut sandsynlighed, men gennem en faglig diskussion, hvor alle relevante informationer inddrages (geologisk/geofysisk data, dannelsehistorie, kemi data, etc.), vil det i nogle tilfælde være muligt at tilskrive nogle af alternativerne en større relativ sandsynlighed end andre.

Multiple model simulering kan ses som en (kompleks) udgave af en følsomhedsanalyse. I stedet for at teste betydningen af én variabel testes blot betydningen af én struktur. I en traditionel følsomhedsanalyse vil det ofte være muligt at give nogle rimelige bud på variationsbredden for en variabel (f.eks. minimums- og maksimumsværdier). Dette er imidlertid ikke muligt mht. usikkerheden på den konceptuelle model, og et springende punkt i multiple model simulering er afgørelsen af, hvornår udfaldsrummet af mulige konceptuelle modeller er gennemført tilstrækkeligt, til at få usikkerheden på grund af strukturfejl belyst tilstrækkeligt.

Fordele:

- Gør det muligt at belyse betydningen af usikkerheden på den konceptuelle grundvandsmodel eksplicit.
- Det er muligt at inddrage ekspertviden i vurderingen af mulige alternative konceptuelle modeller, inklusiv viden fra forskellige fagområder såsom geologi og geokemi.

- Promoverer en detaljeret diskussion af systemforståelsen, og reducere risikoen for at have overset vigtige forhold.

Ulemper:

- Vurderingen af alternativer er subjektiv og derfor afhængig af personerne i modelteamet samt deres erfaringer.
- Det kan ikke garanteres at alle relevante alternativer har været afprøvet.
- Det er ikke muligt at give en sandsynlighed for de enkelte alternativer, ofte vil det end ikke være muligt at give en relativ vurdering.

19.6.9 Ekspertvurdering

Ekspertvurdering dækker over en subjektiv vurdering af usikkerheden foretaget af en ekspert. En ekspertvurdering er ofte det eneste alternativ i de tilfælde, hvor vi ikke kender hele udfaldsrummet for en variabel, eller ikke har tilstrækkeligt med empirisk data til statistisk karakterisering af usikkerheden. I disse tilfælde bliver vi nødt til at vurdere f.eks. minimums- og maksimumsværdier, der kan benyttes i en følsomhedsanalyse til vurdering af "worst-case", eller give et bud på en fordelingsfunktion, hvis målet er en statistisk usikkerhedsvurdering. Et eksempel kan være, at der for nettonedbøren er beregnet én (deterministisk) værdi, f.eks. ved anvendelse af en given model, og der er enighed om, at denne størrelse er usikker, men der findes ingen hårde data til at kvantificere usikkerheden. I denne situation kan en erfaren person give et bud på et forventeligt interval, f.eks. baseret på tidligere studier og kendskab til andre modeller i det pågældende område. Gøres der tillige en antagelse om sandsynlighedsfordelingen (eksempelvis normalfordeling), kan der således konstrueres en sandsynlighedsfordeling for nettonedbøren, baseret på en ekspert vurderingen.

Ekspert vurdering indgår implicit i enhver usikkerhedsanalyse, da første step altid er en vurdering af, hvilke usikkerhedskilder der skal belyses yderligere.

Udførelse: Ekspertvurdering reflekterer ekspertens tillid til en given variabel, og er således en subjektiv vurdering. Da forskellige personer vil have forskellig tillid til eksempelvis de metoder data er fremskaffet på (feltstudier, modeller etc.), vil der også være forskellige bud på usikkerheden. Det kan derfor være en god idé at inddrage flere eksperter i vurderingerne i et forsøg på at undgå bias. Ved at opnå konsensus omkring usikkerheden mellem flere eksperter, styrkes tilliden til de subjektive usikkerhedsintervaller. Man kan selvfølgelig også risikere, at der ikke kan opnås konsensus og man skal da vælge, om der skal foretages en aggregering af de estimerede usikkerheder, eller om man har større tiltro til én/nogle af eksperterne fremfor andre.

Da der er tale om subjektive vurderinger og valg, er det vigtigt at ekspertvurderingen dokumenteres detaljeret, så det bliver gennemskueligt, hvordan usikkerheden blev fastsat, f.eks. af hvem og på hvilket grundlag (videnskabelige undersøgelser, andre modeller i området, erfaring generelt o.s.v.)

Fordele:

- Det er muligt at inddrage al viden, herunder erfaringer fra lignende opgaver og information der ikke ellers kan formaliseres.
- Graden af uenighed blandt eksperter synliggøres

Ulemper:

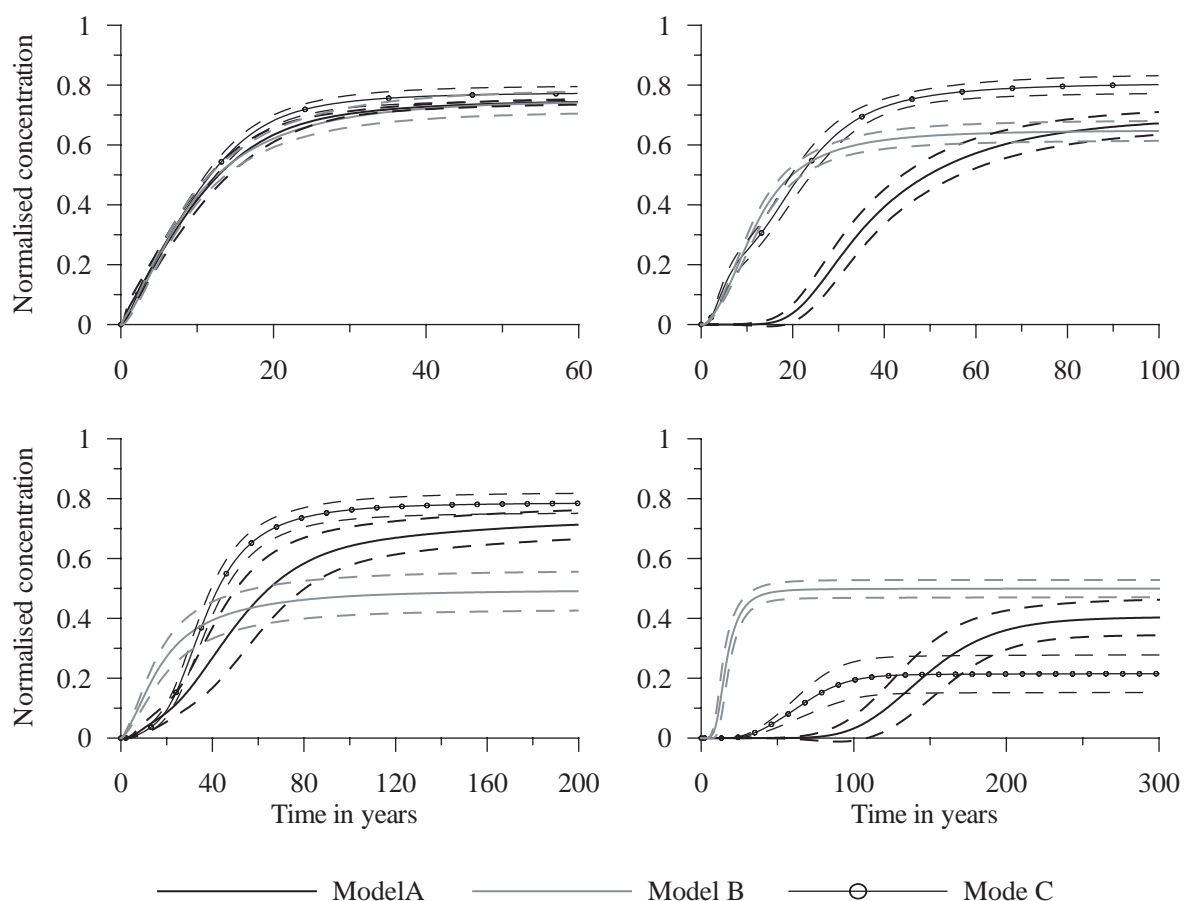
- Metoden er subjektiv og udfaldet vil afhænge af valget af eksperter.
- Sandsynligheden for at en vurdering er korrekt er ikke ligefrem proportional med antallet af eksperter der deler denne vurdering.
- Hvis eksperterne er uenige kan det være svært at vægte de forskellige vurderinger indbyrdes.

19.7 FALDGRUBER OG KRITISKE PROBLEMSTILLINGER

I forbindelse med en usikkerhedsvurdering er der to overordnede faldgruber:

1. Manglende identificering og dokumentation af usikkerhedskilder
2. Manglende kendskab til teori og antagelser

Det første punkt vedrører problematikken omkring identificering af usikkerhedskilder og en overskuelig dokumentation samt prioritering af disse. Vægtes denne identificering og prioritering ikke tilstrækkeligt, er der to oplagte faldgruber: a) væsentlige usikkerhedskilder identificeres ikke, b) de usikkerhedsbidrag, der inddrages i usikkerhedsanalysen, er ikke de mest betydende bidrag. Et ofte set eksempel er, at usikkerhedsanalysen foretages ved en propagering af parameterusikkerheden, ved eksempelvis Monte Carlo simuleringer, uden betydningen af denne usikkerhed er vurderet i relation til øvrige usikkerhedskilder. De grundvandsmodeller der anvendes i Danmark, tilhører primært gruppen af distribuerede mekanistisk baserede modeller (eller proces orienterede modeller)



Figur 19.7 Simuleret koncentration i fire indvindingsboringer for tre konceptuelle modeller (A, B og C). Stiplet linier angiver 95% konfidensintervaller under antagelse af usikkerhed på modelparametre og input data alene, ved Monte Carlo simuleringer.

såsom f.eks. MODFLOW og MIKE SHE. Til afvikling af disse modeller skal der estimeres et stort antal model parameter, ligesom der skal specificeres input data. Da både parametre og data er behæftet med usikkerhed er det logisk at antage, at disse størrelser, som minimum, bidrager væsentligt til den samlede usikkerhed. Men herfra kan der ikke sluttes, at parametre og input data altid

udgør det væsentligste usikkerhedsbidrag. Dette er bl.a. illustreret af Højberg & Refsgaard (2005), hvor betydningen af usikkerhed i den geologiske model er sammenlignet med usikkerheden relateret til modelparametrene. Tre uafhængige hydrogeologiske modeller blev konstrueret og kalibreret, hvorefter parameterusikkerheden for hver af modellerne blev kvantificeret ved Monte Carlo simuleringer. Analysen viste, at det ikke var muligt at beskrive den totale usikkerhed ved en propagering af usikkerheden på modelparametrene alene. Variationen mellem de konceptuelle modeller var mindst for de variable, der var anvendt i kalibreringen såsom hydraulisk trykniveau. I forbindelse med transportsimuleringer var forskellen mellem de konceptuelle modeller til gengæld så stor, at parameterusikkerheden reelt var ubetydelig, figur 19.7. Havde usikkerhedsanalysen i dette tilfælde kun inkluderet parameterusikkerheden, står det klart at den reelle usikkerhed var blevet kraftigt underestimeret, og vi havde fået en falsk tillid til modellens troværdighed. Eksemplet illustrerer vigtigheden af, at der foretages en usikkerhedsvurdering mht. hvilke kilder der er, og hvilke der har størst betydning, så ressourcerne kan anvendes bedst for opnåelse af "mest sikkerhed for pengene".

En anden type af faldgruber er relateret til udøverens kendskab til den bagvedliggende teori, og herunder specielt hvilke forudsætninger og antagelser der er gjort i forbindelse med udviklingen af teorien. I takt med at flere og flere GUIs tilbyder skræddersyede rutiner til afvikling af en usikkerhedsanalyse, bliver det både hurtigere og lettere at udføre disse analyse, og fordrer kun ringe eller slet ingen kendskab til teorien bag metoderne. Uden et minimum af kendskab til teorien kan man risikere at anvende en metode i tilfælde, hvor de nødvendige antagelser ikke er opfyldte, og analysen derfor, i bedste fald, kun giver en approksimativ kvantificering. Et manglende kendskab til den anvendte metode kan endvidere føre til en fejltolkning af resultatet, samt manglende kvalificeret bud på styrken af den anvendte analyse. Disse forhold vil ligeledes kunne føre til en falsk tillid til vores kendskab til usikkerheden. En anden faldgrube i forbindelse med den anvendte GUI er, at det er nærliggende at anvende den usikkerhedsanalyse, der understøttes af GUI'en, uden en egentlig vurdering af hvorvidt denne metode er den optimale.

19.8 REFERENCER

- Christensen, S. (2004). A synthetic groundwater modelling study of the accuracy of GLUE uncertainty intervals. *Nordic Hydrology*, 35(1), 45-59.
- Beven, K. and Binley, A. (1992). The future of distributed models - model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes*, 6(3), 279-298.
- Brown JD (2004) Knowledge, uncertainty and physical geography: towards the development of methodologies for questioning belief. *Transactions of the Institute of British Geographers*. *Accepted*.
- Doherty, J. (2004). Model independent parameter estimation (PEST). Manual. Watermark Numerical Computing. <http://www.sspa.com/pest>
- Helton, J.C. and Davis, F.J. (2003). Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. *Reliability Engineering and System Safety*, 81, 23-69.
- Hill, M.C., Banta, E.R., Harbaugh, A.W., Anderman, E.R. (2000). MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey modular ground-water model – User guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter-estimation processes and three post-processing programs, U.S. Geological Survey, Open-file Report 00-184, 209 p.
- Hill, M.C. and Østerby, O. (2003). Determining extreme parameter correlation in ground water models. *Ground Water*, 41(4), 420-430.

Højberg, A.L. and Refsgaard, J.C. (2005). Model uncertainty - Parameter uncertainty versus conceptual models. Water Science & Technology, *submitted*

Neuman S.P. and Wierenga P.J. (2003). A comprehensive strategy of hydrogeologic modeling and uncertainty analysis for nuclear facilities and sites. NUREG/CR-6805, U.S. Nuclear Regulatory Commission.

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, 116 p.

Refsgaard, J.C. , van der Sluijs J.P., Højberg, A.L. and Vanrolleghem, P. (2005) Harmoni-CA Guidance, Uncertainty Analysis, <http://www.harmoni-ca.info>

Van der Sluijs, J.P., Janssen, P.H.M., Petersen, A.C., Kloprogge, P., Risbey, J.S., Tuinstra, W. and Ravetz, J.R. (2004) RIVM/MNP Guidance for Uncertainty Assessment and Communication Tool Catalogue for Uncertainty Assessment. Utrecht University.
(<http://www.nusap.net/sections.php?op=viewarticle&artid=17>)

Walker, W.E., Harremoës, P., Rotmans, J., Van Der Sluijs, J.P., Van Asselt, M.B.A., Janssen, P., Kreyer von Krauss, M.P. (2003) Defining Uncertainty A Conceptual Basis for Uncertainty Management in Model-Based Decision Support. *Intergrated Assessment*, 4(1), 7-17.

Kapitel 20 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 modelsetup 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.

20.1 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:

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.

"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.

"Modelabstract": Et 2 siders abstract der meget kortfattet afgrænser indhold, substans og essens 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).

Modelarkivering: Indberetning af modelsetupfiler og dokumentationsmateriale til landsdækkende modeldatabase (www metadatabase med abstracts, links mm.) fx på CD-rom eller lignende, som 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 21. 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 udføres omkring detailkortlægning og zonerings. 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.

20.2 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 kommunikerer 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 glacial-tektoniske 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 laggrænskort, 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 modeller 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 parameterverdi 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 infiltrationsbasiner, nedsvivning 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 zoneringer 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 zone-ring 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, tidsskridt 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><i>7.1 Beskriv den anvendte kalibreringsmetodik og anvendte kvantitative og kvalitative kriterier.</i> Statistiske krav til residualafvigelser 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><i>7.2 Kalibreringsmål (targets).</i> 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><i>7.3 Kalibreringsjournal.</i> Der foretages en beskrivelse i tabelform af udvalgte kørsler hvor der er ændret væsentligt på den konceptuelle model eller modelopstilling, zonerings af parameterverdier 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><i>7.4 Kalibreringsresultat.</i> Kalibreringsresultatet præsenteres i form af: (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 residualverdier 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> <p><i>7.5 Resultater af sensitivitetsanalyser og invers modellering</i> 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><i>8.1 Valideringsmetode</i> (stationær og dynamisk model) <i>8.2 Kvantitativ bedømmelse af valideringstesten</i> 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 simuleringens resultater.</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, afsænkning 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 udfra 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>

20.3 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 Vandressource 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 21 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 felldata, kan denne information godt efterfølgende indbygges i den regionale model, forudsat man er omhyggelig med evt. skalaproblemer. Derimod kan man ikke uden videre overføre parameterverdier fra den kalibrerede lokale model tilbage til den regionale model.

21.1 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 20).

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 databa-

sen 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.

21.2 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 initialtrykniveaufiler 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).

21.3 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.

21.4 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 8). 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.

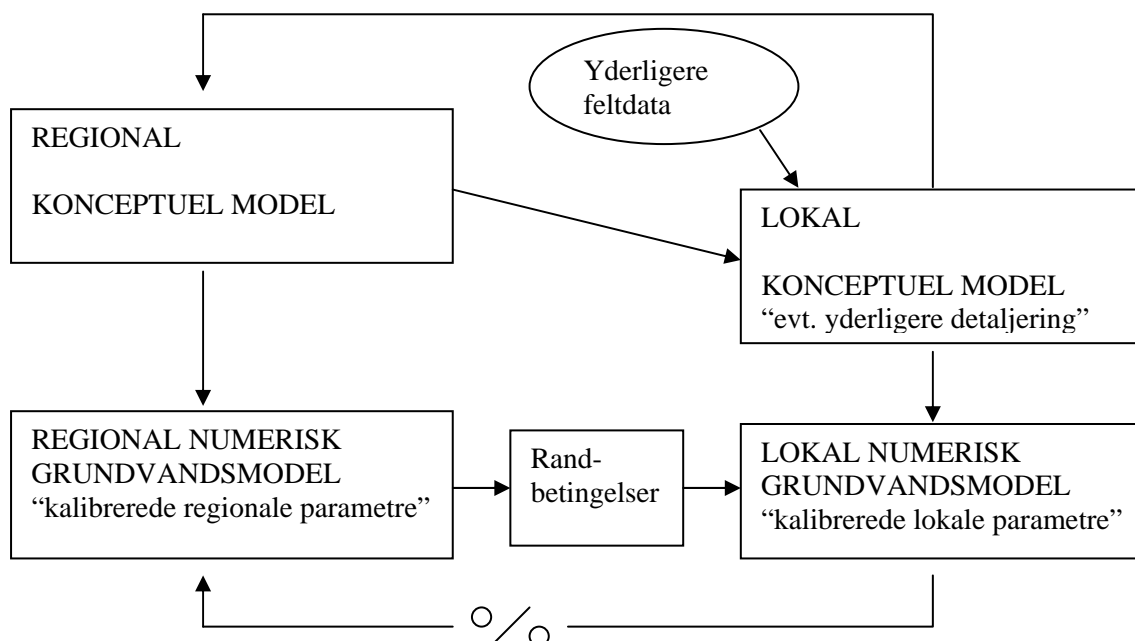
Man kan godt genbruge et eksisterende vandløbssetup (fx MIKE 11 filer). Men det kan være nødvendigt at medtage flere mindre vandløb, tilløb, grøfter mm.

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

21.5 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 udfra 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. Følgende ”præliminære” spilleregler, som beskrevet i figur 21.1, foreslås imidlertid.



Figur 21.1 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.

21.6 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 22 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 forfinede grid, autokalibrering, sensitivitsanalyse, stokastisk simulering, præsentations- og udtræksmuligheder, nuværende udvikling, brugervenlighed, support mv.

22.1 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 6).

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 zonerung.

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 udvikleres og producenteres 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, er det valgt kun at beskrive følgende koder (motorer), se tabel 22.1:

- Modflow
- Modflow-Surfact
- ModflowT
- MIKE SHE

Og følgende grafiske bruger interfaces (skaller), se tabel 22.2:

- 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 nogle 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 række 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 22.1 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 22.2)	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 beskrivelse)	Nej	Ja (Richards ligning)	Nej
Densitetsbetinget strømning	Under udvikling, HST3D er indbygget, men test cases mangelfulde.	Under udvikling	Under udvikling	Nej
GUI (se tabel 22.2)	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 vandressourcekode 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 bl.a. Groundwater Vistas, GMS 2.1, PMWIN. Surface-2000 på vej.	Koden er primært en ”forbedret” stoftransport-model.

Tabel 22.2 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)

Tabel 22.2 (fortsat)	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 shapefil 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 animering med Visual Groundwater.	Import og eksport til Arc View, Arc Info mm. Indeholder geostatistisk funktionalitet til 3D interpolation, krigging 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. overfladevands-grundvandsmodellering. Modflow Surfact 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 modellører (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 23 KVALITETSSIKRING I FORBINDELSE MED MODELOPGAVER

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Anker Lajer Højberg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelprotokol, udbudsbetingelser, milepæle, reviews, kvalitetssikring

ABSTRACT: Kvalitetssikring er et nødvendigt redskab for at opnå gode og troværdige resultater af en grundvandsmodellering. Det vigtigste element i kvalitetssikring er formentlig at sikre en god og løbende dialog mellem de forskellige aktører: vandressourceforvalter, modellør og interessenter. Andre vigtige elementer er at sikre eksternt review i forbindelse med milepælsmøder, samt at gennemføre valideringstest mod uafhængige data. I kapitlet introduceres støtteværktøjet MoST, som indeholder vejledning i modellering for forskellige aktører, mulighed for løbende monitoring af modelleringsopgaven samt rapportering af hvad der er gennemført af modelleringsaktiviteter.

23.1 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 amtlig 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 eksternt 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 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 samspelet 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.

23.2 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. 1.2). 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.

23.2.1 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.

23.2.2 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.

23.2.3 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 20.2). 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 23.1 giver en anbefaling af hvilke typer reviews, der kan være brug for i forskellige situationer.

Tabel 23.1 Behov for forskellige typer af review i forskellige situationer

	Screening	Overslagsberegninger	Detailberegninger ("Hi fi")	
			Planlægningsstudie/lavrisiko	Grundlag for ekspropriation/højrisiko
Milepæl 1 Hydrogeologisk tolkningsmodel (MOST-Trin 2 Fig. 1.2)	Model appraisal af samlet opgave	Model appraisal	Peer review	Peer review
Milepæl 2 Modelopsætning og nøjagtighedskrav (MOST-Trin 3 Fig. 1.2)		Intet	Peer review	Peer review
Milepæl 3 Kalibrering og validering (MOST-Trin 4 Fig. 1.2)		Peer review	Peer review	Model audit
Milepæl 4 Modelsimuleringer (MOST-Trin 5 Fig. 1.2)		Intet	Peer review	Model audit

23.3 KVALITETSSIKRINGSVÆRKTØJET MOST

Et softwarebaseret støtteværktøj (Modelling Support Tool – MoST) til kvalitetssikring af modelleringprocessen er udviklet inden for rammerne af et EU forskningsprojekt ”Harmonising Quality Assurance in model based catchment and river basin management (HarmoniQuA)” (Refsgaard et al., 2005, Schoilten et al., 2005). Projektgruppen bestod af et konsortium af 12 forskningsinstitutioner fra 10 forskellige lande, ledet af Huub Scholten fra Wageningen University (NL). GEUS havde ansvaret for udvikling af de generelle kvalitetssikringsretningslinier samt for detailbeskrivelserne på grundvandsområdet. Mere information kan findes på www.harmoniqua.org, hvorfra MoST frit kan downloades.

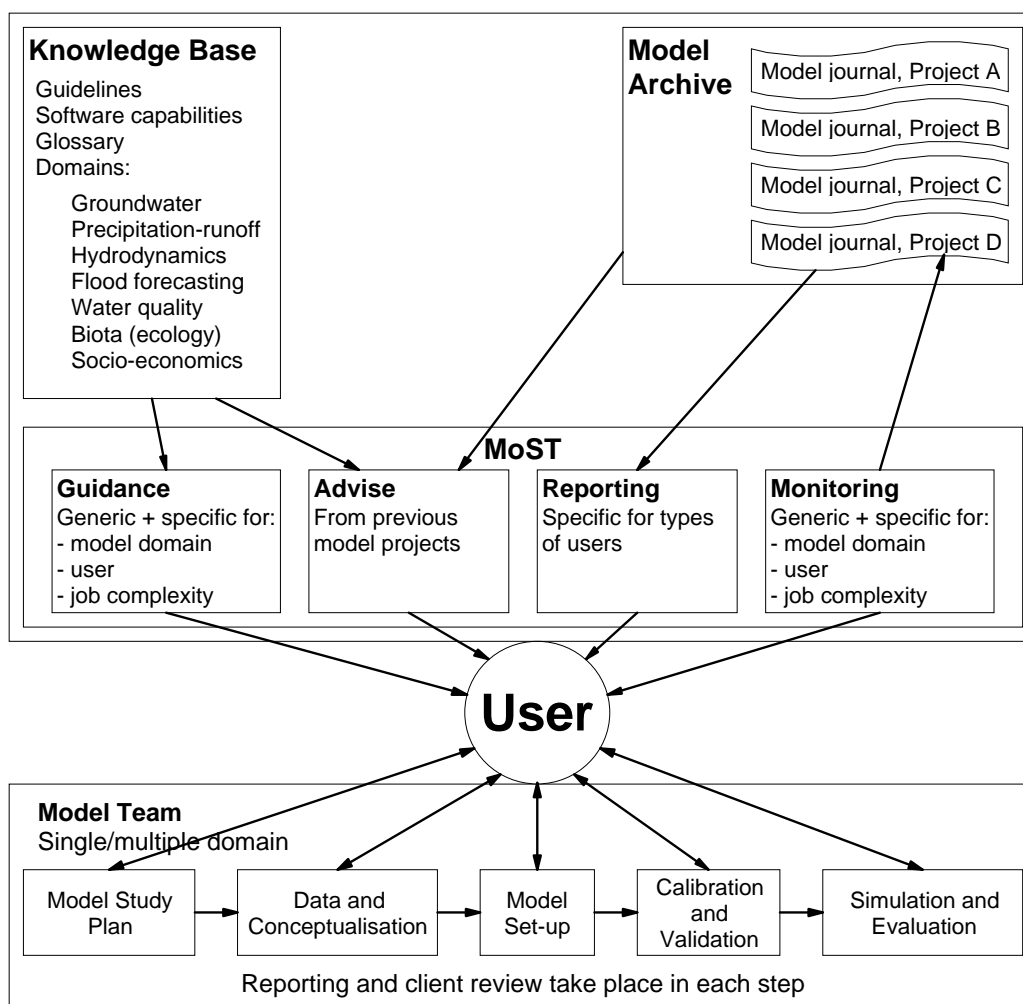
Hovedelementerne i HarmoniQuA er illustreret skematisk i figur 23.1. De to vigtigste elementer er en vidensbase (Knowledge Base) og et software støtteværktøj (MoST). Vidensbasen består af retningslinier for god modelleringspraksis og en gennemarbejdet og konsistent terminologi (glossary). Der findes et sæt generelle retningslinier og et supplement for hvert af syv modelleringsdomæner (grundvand, nedbør-afstrømning, hydrodynamisk, overfladevandskvalitet, flood forecasting, økologi og socio-økonomi). I retningslinierne skelnes der mellem forskellige brugere og deres respektive ansvar, ligesom retningslinierne differentieres, så omfanget af opgaverne kan gøres afhængig af modelleringsopgavens kompleksitet. Modelleringsprocessen følger protokollen i

figur 1.2 med fem hovedtrin (steps), som hver er inddelt i et antal opgaver (tasks). De fem hovedtrin er vist nederst på figur 23.1. Hvert trin afsluttes med en dialogprocess mellem klient og rådgiver (reporting og reviews), svarende til milepæle. I retningslinierne beskrives for hver opgave, hvilke aktiviteter der bør gennemføres, hvilke metoder der fx kan benyttes samt hvem der har ansvaret for at det skal ske. HarmoniQuA retningslinierne opererer med differentierede niveauer, således at en hel del af de viste opgaver og aktiviteter efter behov kan udelades i konkrete opgaver.

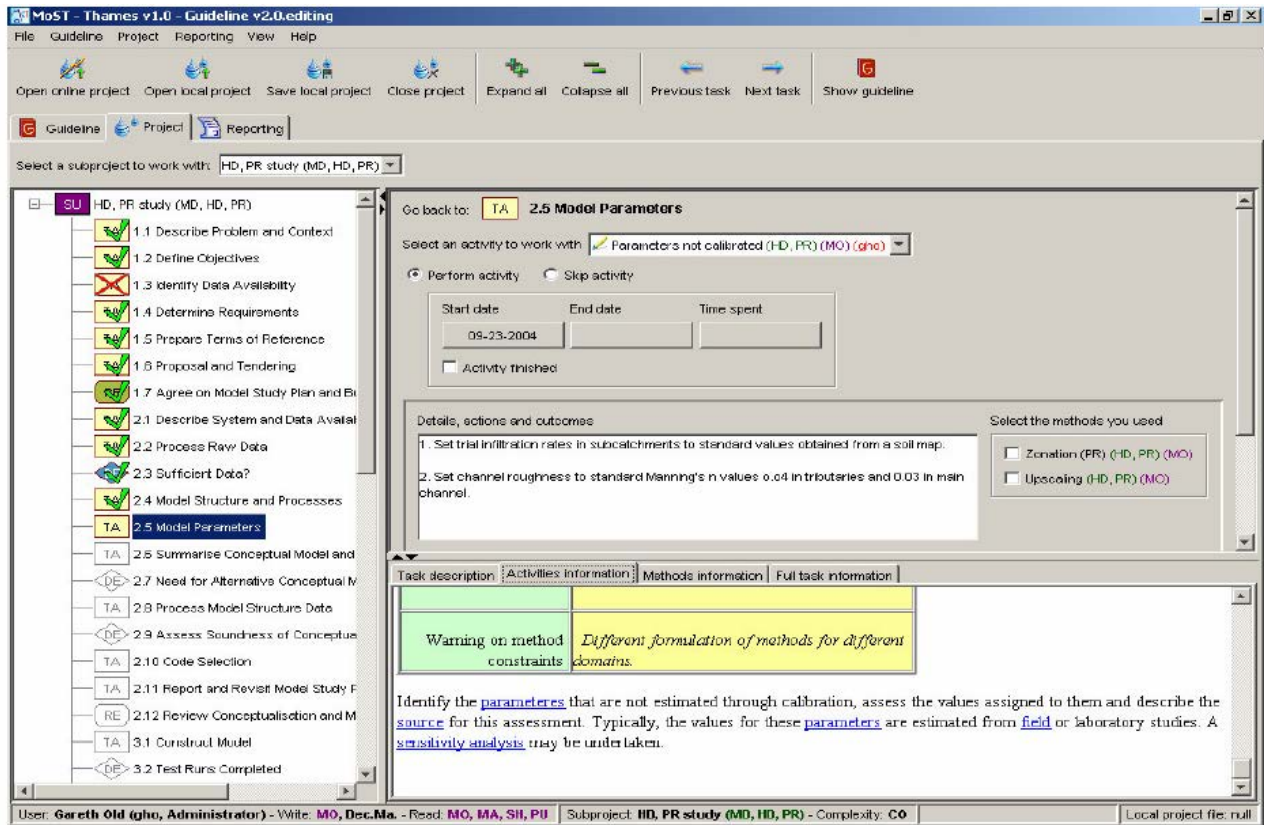
MoST er udviklet i et Windows miljø. De væsentligste typer af funktionalitet er:

- 'Guidance' der viser retningslinierne på skærm (eller print) filtreret efter en bruger- og opgaveprofil, så kun det der er relevant for den enkelte bruger i et konkret projekt vises.
- 'Monitoring' der hjælper med at holde styr på hvor langt man er i modelleringsopgaven og kan benyttes til at overvåge om alle parter nu også har løst deres del af opgaven. Monitoring fungerer som en logging af hele processen, hvor man kan vedlægge vigtige dokumenter såsom parameterfiler og mødereferater.
- 'Reporting' der er i stand til at producere en rapport over en gennemført modelleringsopgave.
- 'Advisor' der er tænkt som et værktøj der kan søge i gamle modelleringsopgaver og hurtigt hjælpe med at finde ud af hvad man gjorde i lignende situationer i tidligere opgaver.

Figur 23.2 viser et skærmbillede fra MoST.



Figur 23.1 Oversigt over HarmoniQuA struktur med Knowledge Base (vidensbase) og MoST (støtteværktøj).



Figur 23.2 Skærbillede fra HarmoniQuA's MoST

23.4 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 20-50% 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 grundvandszonering med tilhørende muligheder for ekspropriative indgreb, er en formel kvalitetssikringsprocedure på linie med ovenstående en absolut forudsætning.

23.5 REFERENCER

Middlemis H (2000) Murray-Darling Basin Commission. Groundwater flow modelling guideline. Aquaterra Consulting Pty Ltd., South Perth. Western Australia. Project no. 125.

Refsgaard JC, Henriksen HJ, Harrar WG, Scholten H, Kassahun A (2005) Quality assurance in model based water management – Review of existing practice and outline of new approaches. *Environmental Modelling & Software*, 20, 1201-1215.

Scholten H, Kassahun A, Refsgaard JC, Kargas T, Gavardinas C, Beulens AJM (2005) A methodology to support multidisciplinary model-based water management. *Environmental Modelling & Software*, accepted.

APPENDIX A 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.

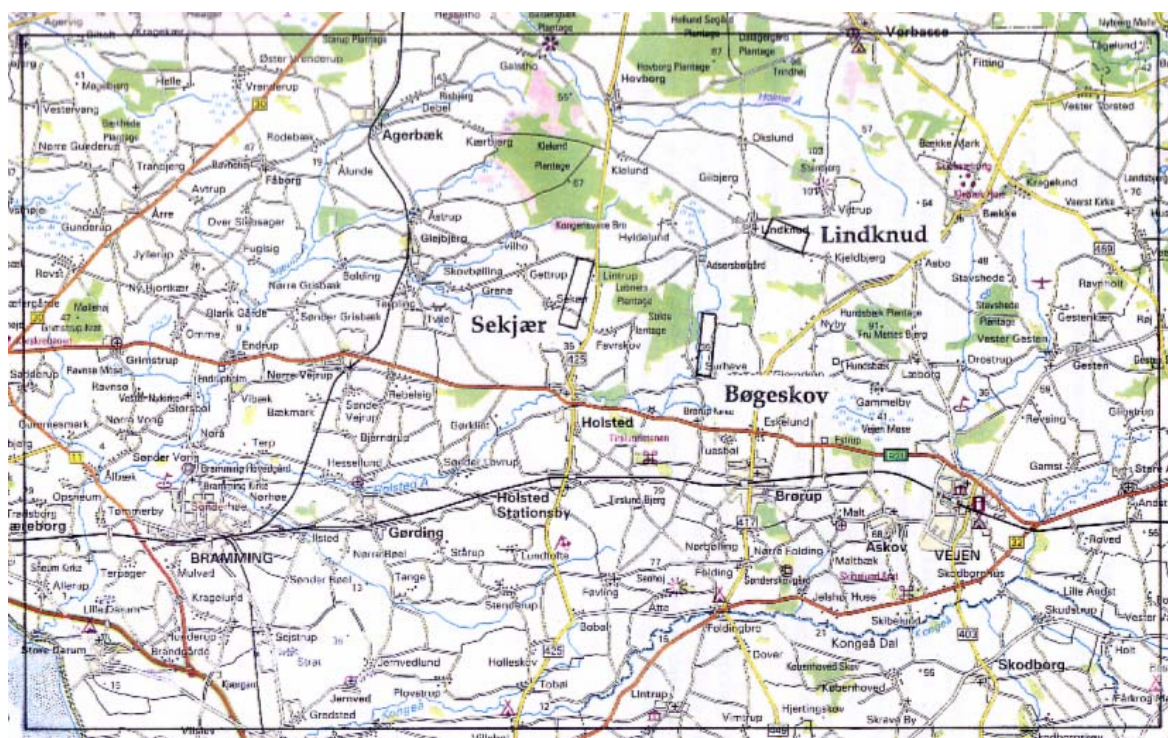
A.1 FORMÅLET MED OPSTILLING AF MODEL

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 monitoring 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.



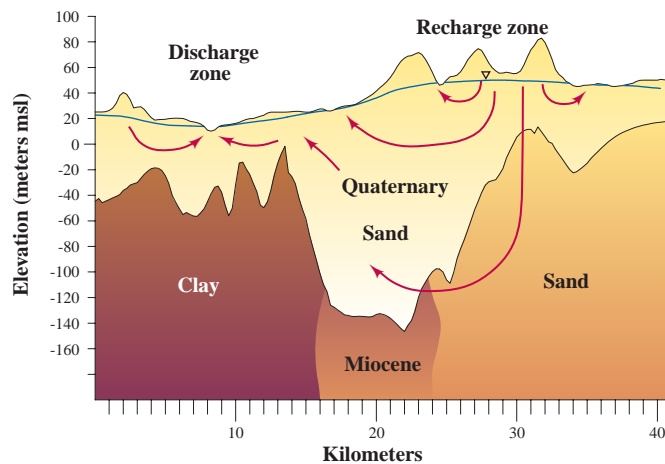
Figur 1 Modelområde for Esbjergmodellen. De indlagte rektangler angiver potentiel placering af nye kildepladser.

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 borerer fra GEUS Jupiter boreringsdatabase suppleret op med 15 nye borerer, oplysninger fra den geologiske kortlægning i området samt geofysiske data og kortlægninger i form af borehulslogs i de nye borerer, gravemetri, elektromagnetiske sonderinger og seismik. Der blev fremstillet 18 regionale geologiske profiler samt 6 detaljerede geologiske profiler. Prækvartærøverfladens 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 lavpermeable 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 korrigeret for vind- og befugtningstab 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 arealtyper: 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 drænastrømning 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 udtegnet 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 vandløbslokaltet. 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 transmissivitetseværdier 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. Miocenet blev indledningsvist tillagt lave transmissivitetseværdier i den vestlige del af modelområdet. Der forelå i alt ca. 25 prøvepumpningsresultater med T-værdi, filterlængde, filtermidtpunkt, samt hydraulisk ledningsevne for såvel Miocene og Kvartære filtersatte borer (15 korttidsprøvepumpninger og 13 længerevarende prøvepumpninger). Numeriske simuleringer af 3 længerevarende prøvepumpninger blev udført med RADSYP (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 miocene 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 grundvandets strømningsveje. Programmet benytter løsningen fra strømningsmodellen på trykni-

veaet 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 grundvandets 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 postprocessering 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

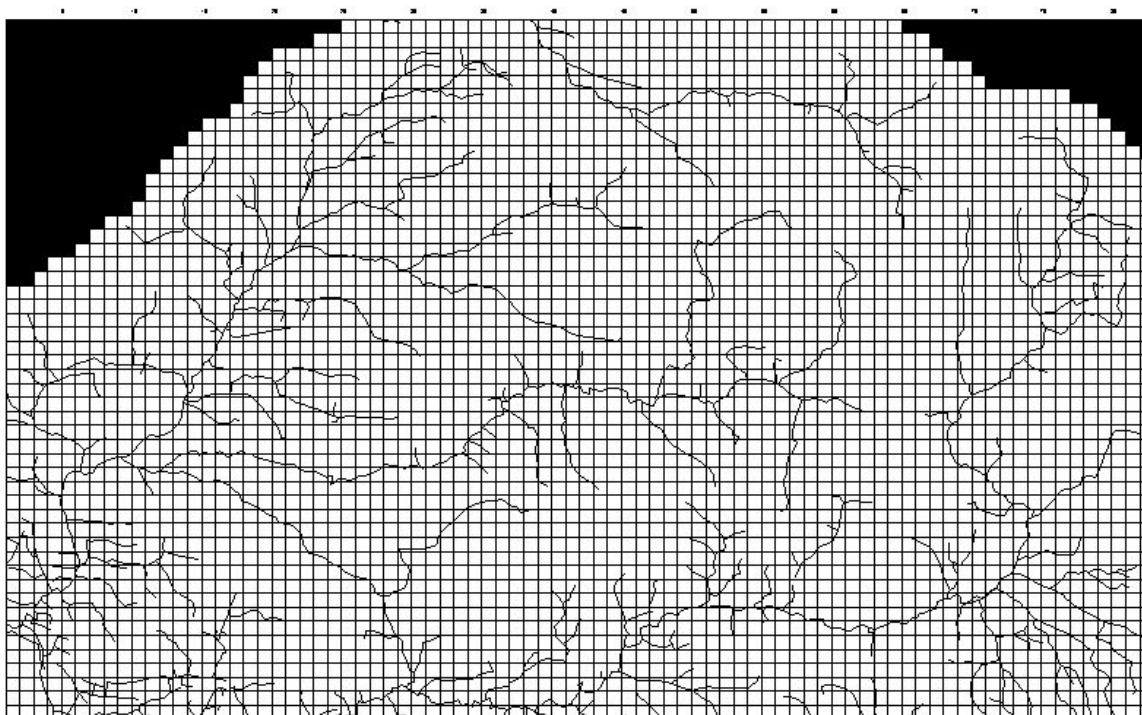
Modelopstilling er valgt af flere årsager. For det første har det været formålet at opstille en 3D model, som giver mulighed for at beskrive partikelbaner i 3 dimensioner, idet en sådan er afgørende for beskrivelse af de særligt grundvands-dannende områder til et givent kildefelt. For det andet er geologien 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)

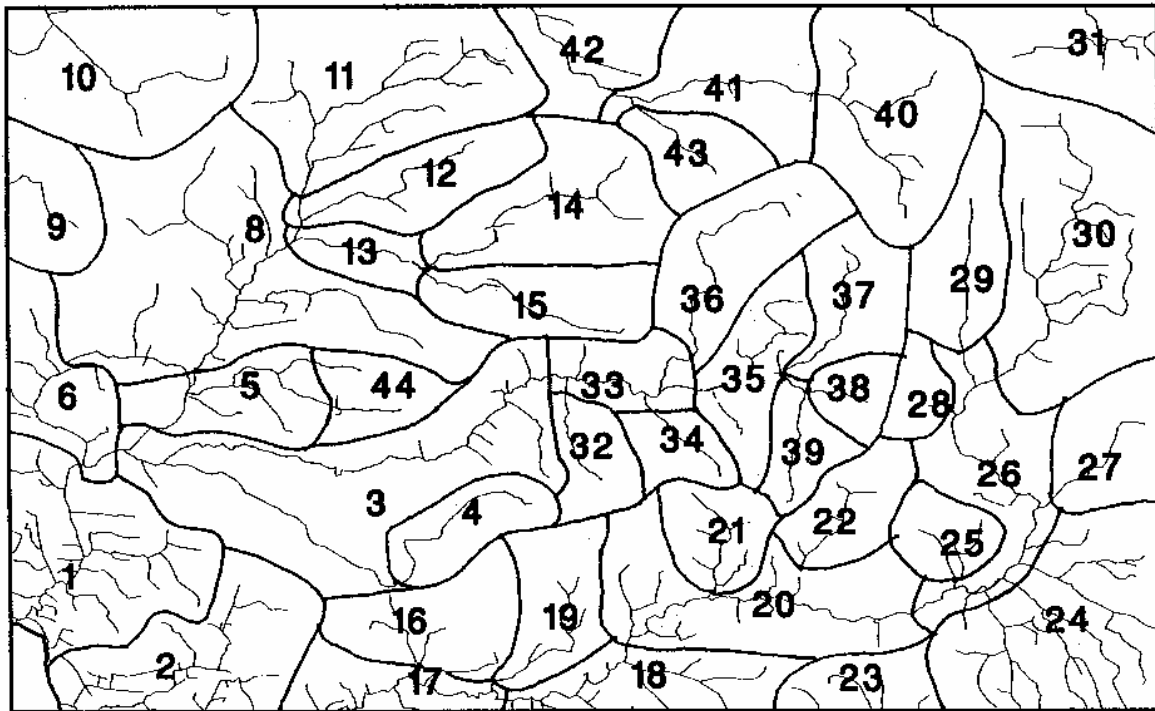


Figur 3 Numerisk repræsentation af modelområdet. De fuldt optrukne linier viser det numerisk net. De sorte områder angiver inaktive celler (no-flow rande).

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 beregningsscenerierne. 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.

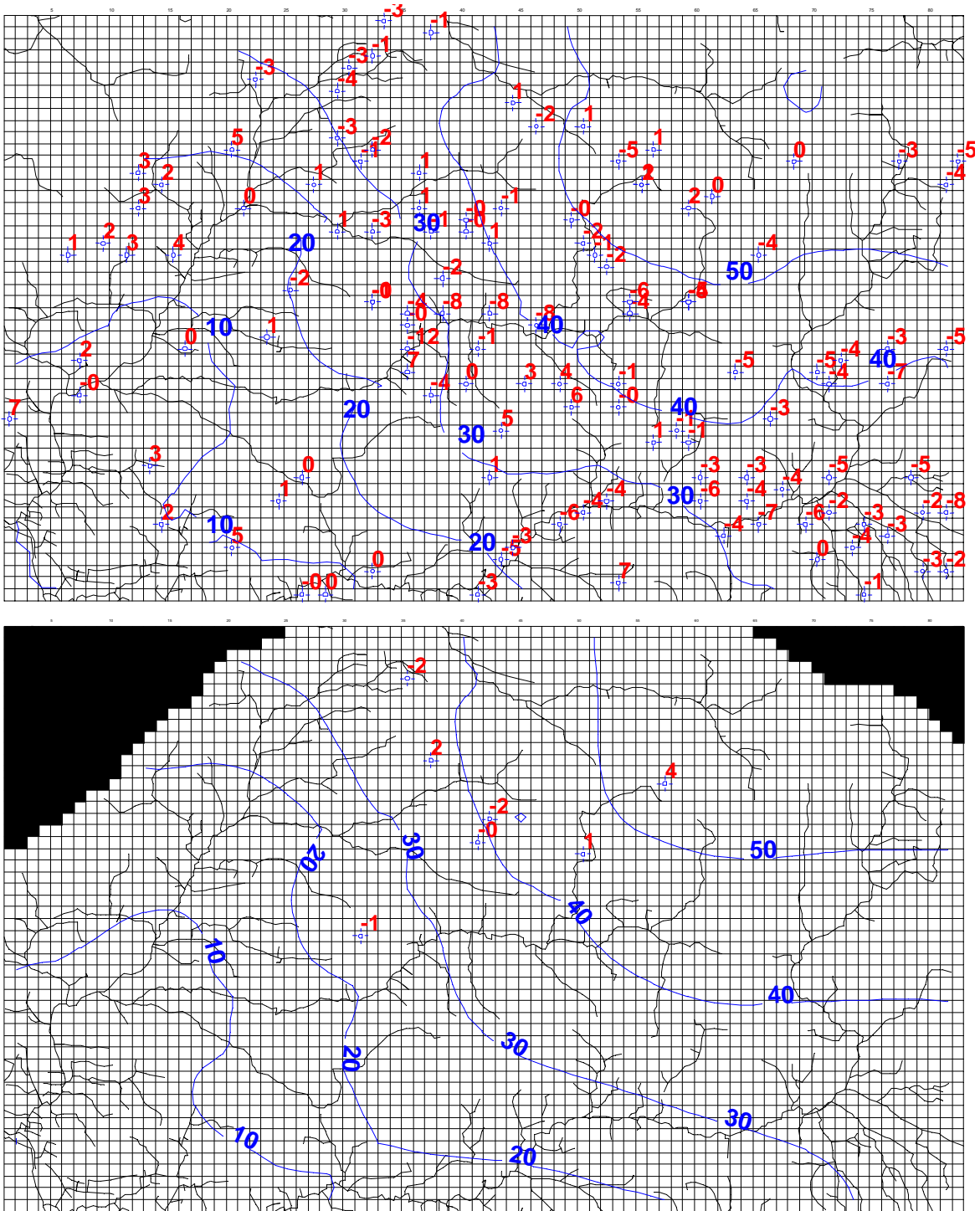
A.6 KALIBRERING AF MODEL

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

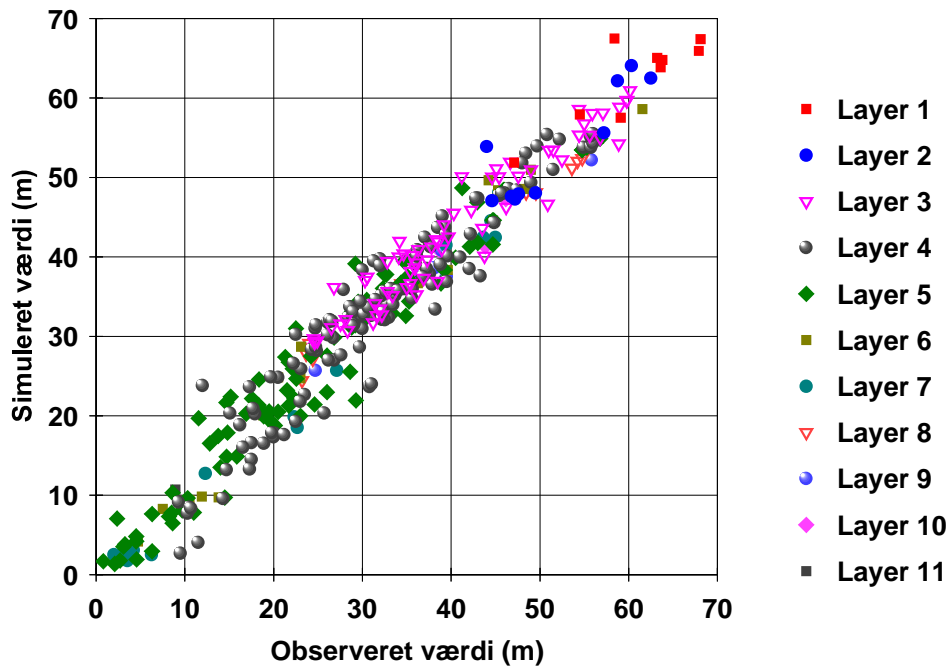
I figur 5 er vist simuleret trykniveau for lag 3 og 8 samt afvigelser mellem målt og simuleret trykniveau. Lag 3 repræsenterer intervallet mellem kote 0 og 20 m og er det øverste gennemgående lag i hele modelområdet. Lag 8 repræsenterer intervallet mellem kote -80 og -100 m.



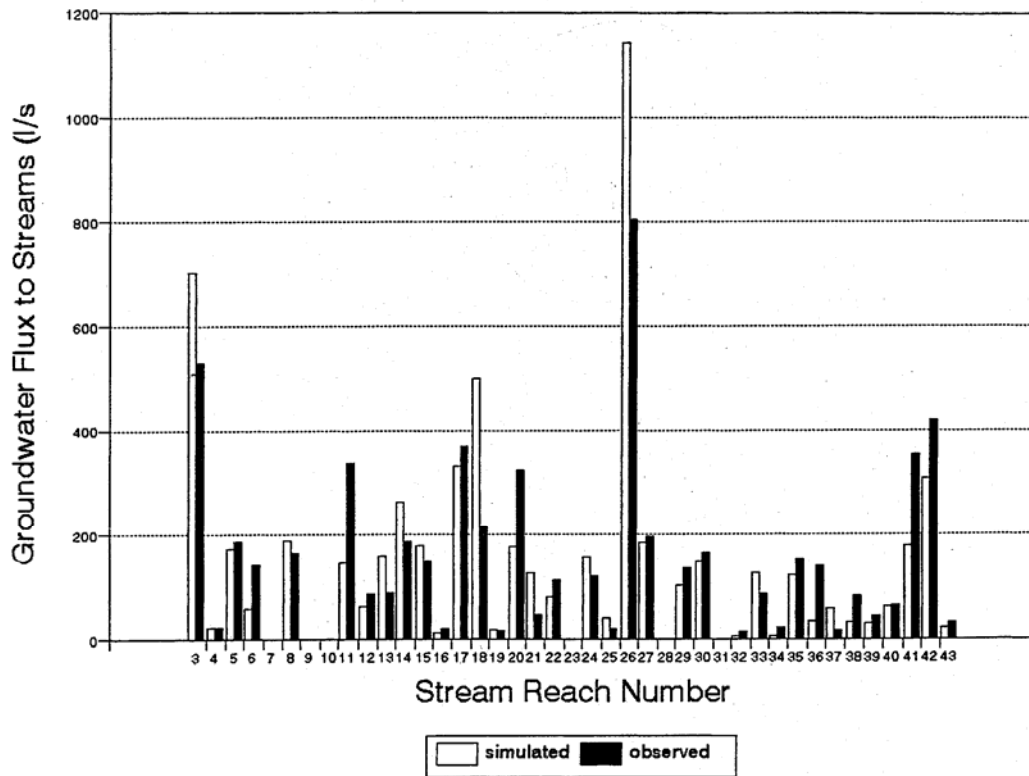
Figur 5 Simuleret trykniveau for lag 3 (øverst) og lag 8 (nederst) vist som konturlinier. For hvert observationspunkt er afvigelsen mellem observeret og simuleret trykniveau angivet.

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.

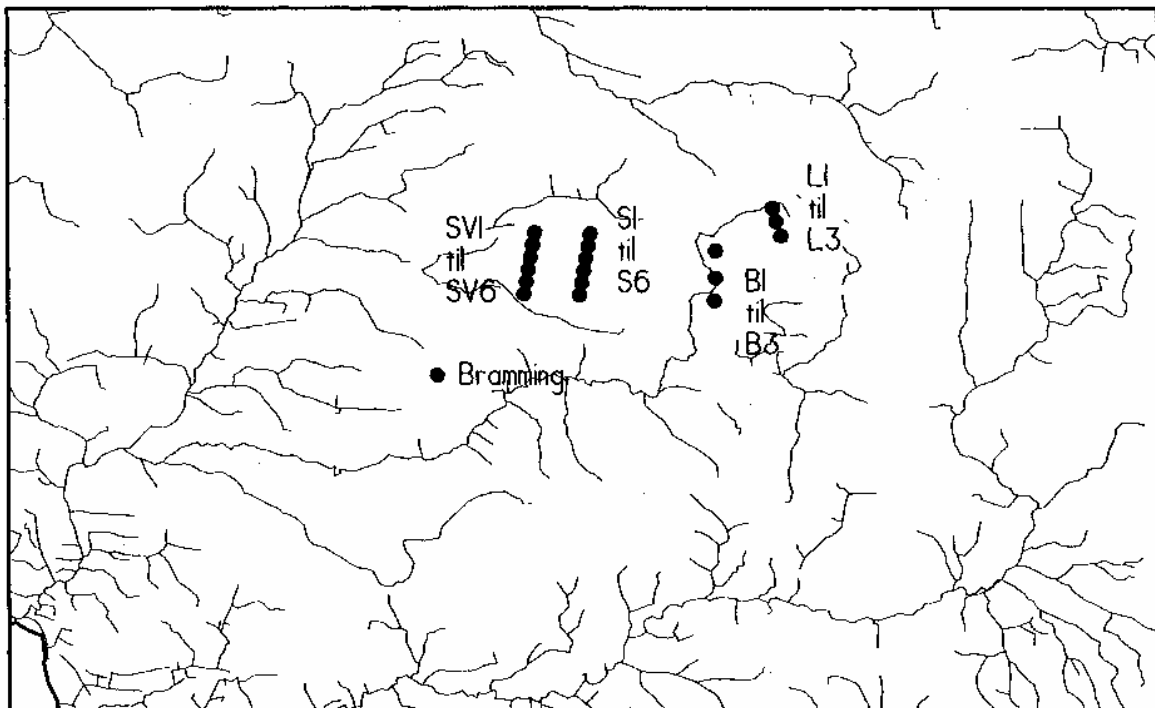
Tabel 3 Sommeret massebalance (i l/s og mm/år).

Vandbalance størrelse	l/s (%)	mm/år
<u>Ind i modellen:</u>		
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
<u>Ud af modellen:</u>		
Oppumpning i boringer	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.

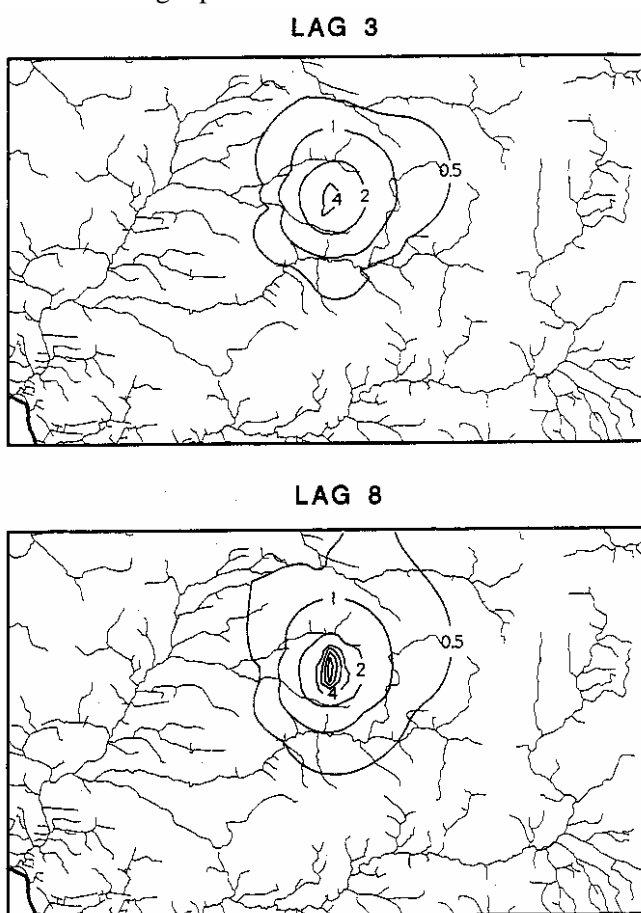
Tabel 4 Udvalgte beregnings scenarier I-III.

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 + 11 + 13
III 3 mill. m ³ fra hvert af områderne: Sekjær, Bøgeskov og Lindknud	s3 + s4 + s5 + b1 + b2 + b3 + 11 + 12 + 13

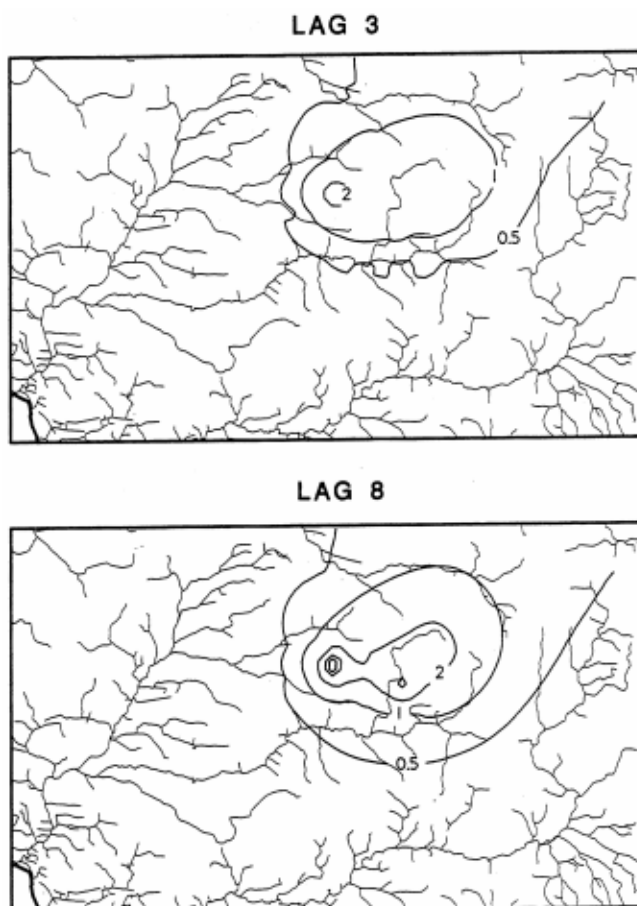
Bemærk at boringer s1 - s6 er nummereret med nr. 1 som den sydligst beliggende og nr. 6 som den nordligste (fig. 8). Gælder også øvrige områder.

A.7.2 Afsenkning af grundvandspejl

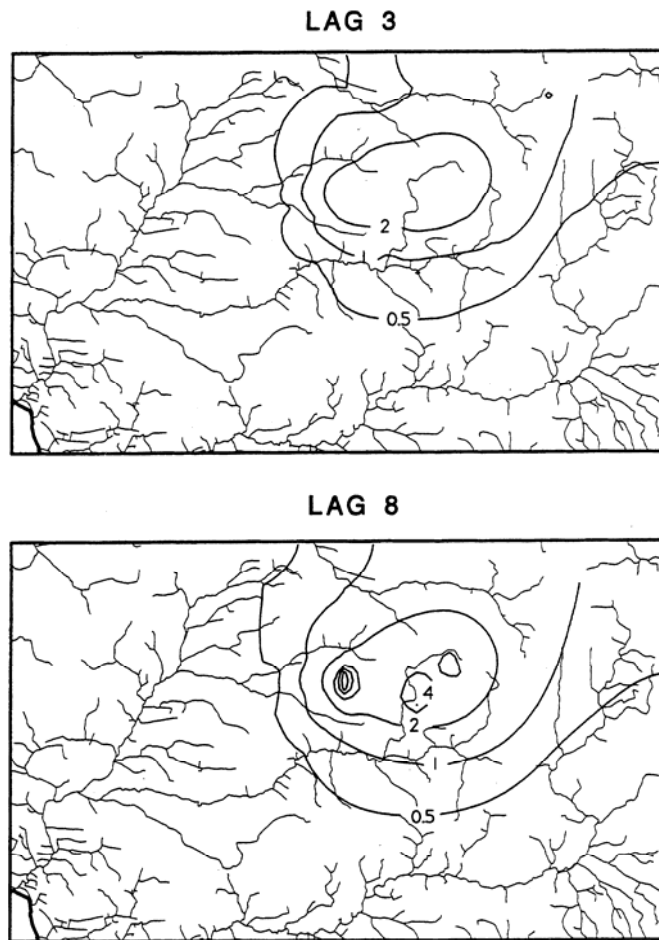
Simuleret afsenkning af trykniveau i lag 3 og lag 8 er vist i figur 9-11. De beregnede afsænkninger breder sig ud over et relativt stort område, og lokalt omkring pumpeboringer (modelgrids 500x500 m) ses afsænkninger omkring 5 - 15 m. I tabel 5 er simulerede afsænkninger sammenstillet i udvalgte punkter.



Figur 9 Afsenkning i lag 3 og 8 ved scenarie I. Konturinterval på 0.5. 1. 2. 4. 6. 8. 10 m.



Figur 10 Afsenkning i lag 3 og 8 ved scenarie II. Konturinterval på 0.5. 1. 2. 4. 6. 8. 10 m.



Figur 11 Afsenkning i lag 3 og 8 ved scenarie III.
Konturinterval på 0.5. 1. 2. 4. 6. 8. 10 m.

Ved scenarie I ses afsænkninger 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 afsænkninger på 2-4 m. I lag 8 i den dybe del af kvartæret ses afsænkninger på 2-10 m i området mellem Nørrebæk og Sekjær bæk (fig. 9).

Ved scenarie II ses større afsænkninger omkring Stilde å (fig.10).

Ved scenarie III ses afsænkninger 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). Afsænkningen 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). Afsænkningerne 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 alt, mill. m ³ /år:	I 6	II 6	III 9
Simuleret afsækning (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

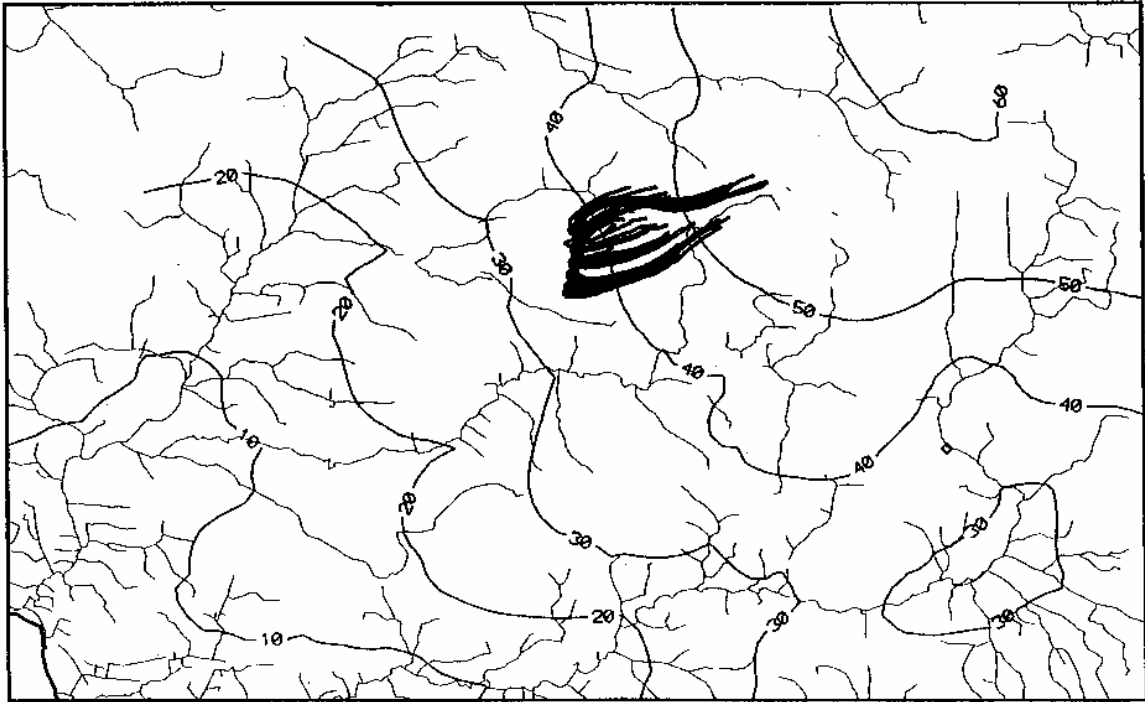
Simulerede partikelbaner og trykniveau i lag 3 er vist i figur 12 - 14. Der er genereret partikelbaner fra 8 punkter i opstrøms retning fra hver boring. En test med 50 punkter gav stort set tilsvarende resultat. De viste partikelbaner repræsenterer en projicering af baner fra samtlige lag. Det areal, 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.

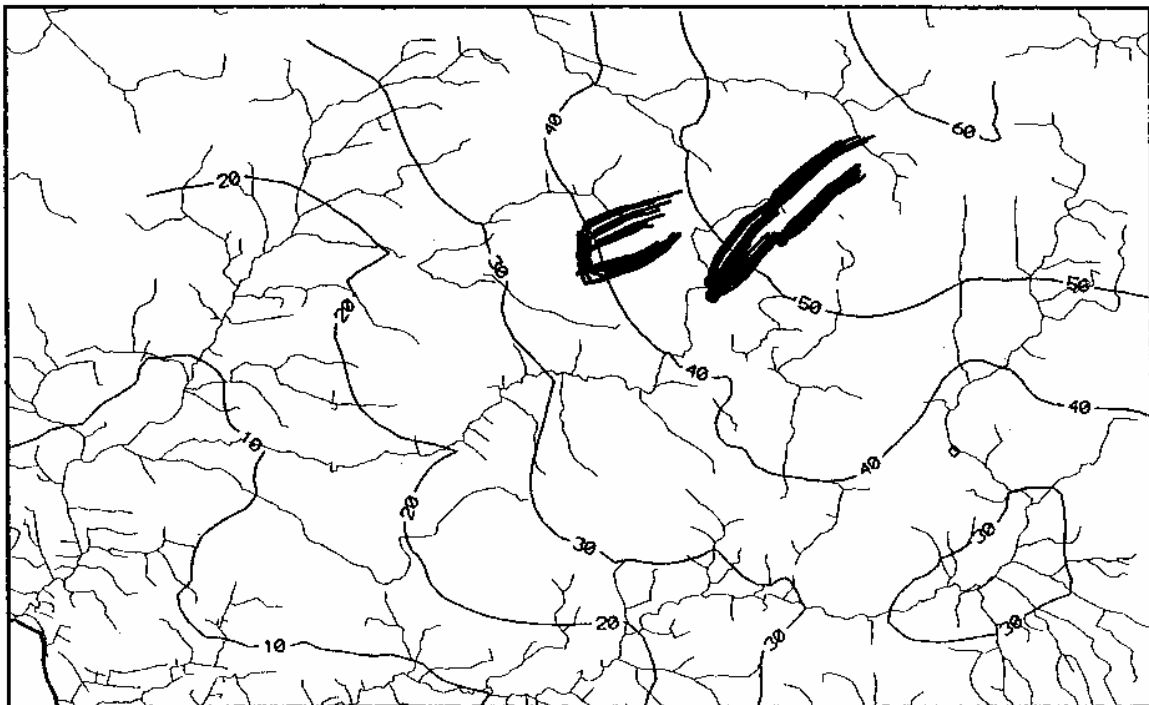
Scenarie I giver et relativt sammenhængende indvindingsopland beliggende mellem Nørrebæk, Sekjær bæk og øvre del af Stilde å (fig. 12).

Scenarie II giver 2 adskilte indvindingsoplande, idet Bøgeskov og Lindknud området til dels 'smelter sammen' til et opland (fig. 13).

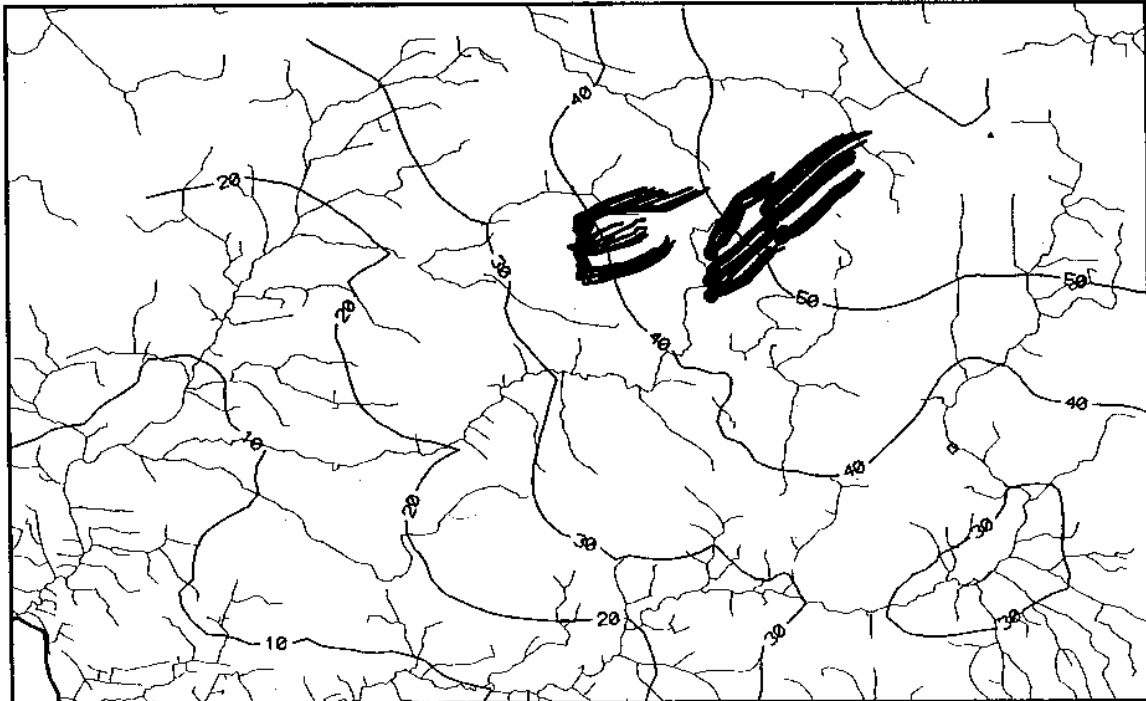
Scenarie III med forøget indvinding giver 'næsten' ét sammenhængende opland (fig. 14).



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 indvindingens størrelse, idet det antages, at der indenfor indvindingsoplandet enten sker nedsivning svarende til nettonedbøren eller ingen nedsivning (på grund af lavpermeable lag og opsvivning 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, indvindingens 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.

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.

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 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 rensed 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, Teknikkerrapport 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-Resource Consultants, 7944 Wisconsin Avenue, Bethesda, Maryland 20814, USA.

APPENDIX B 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 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.

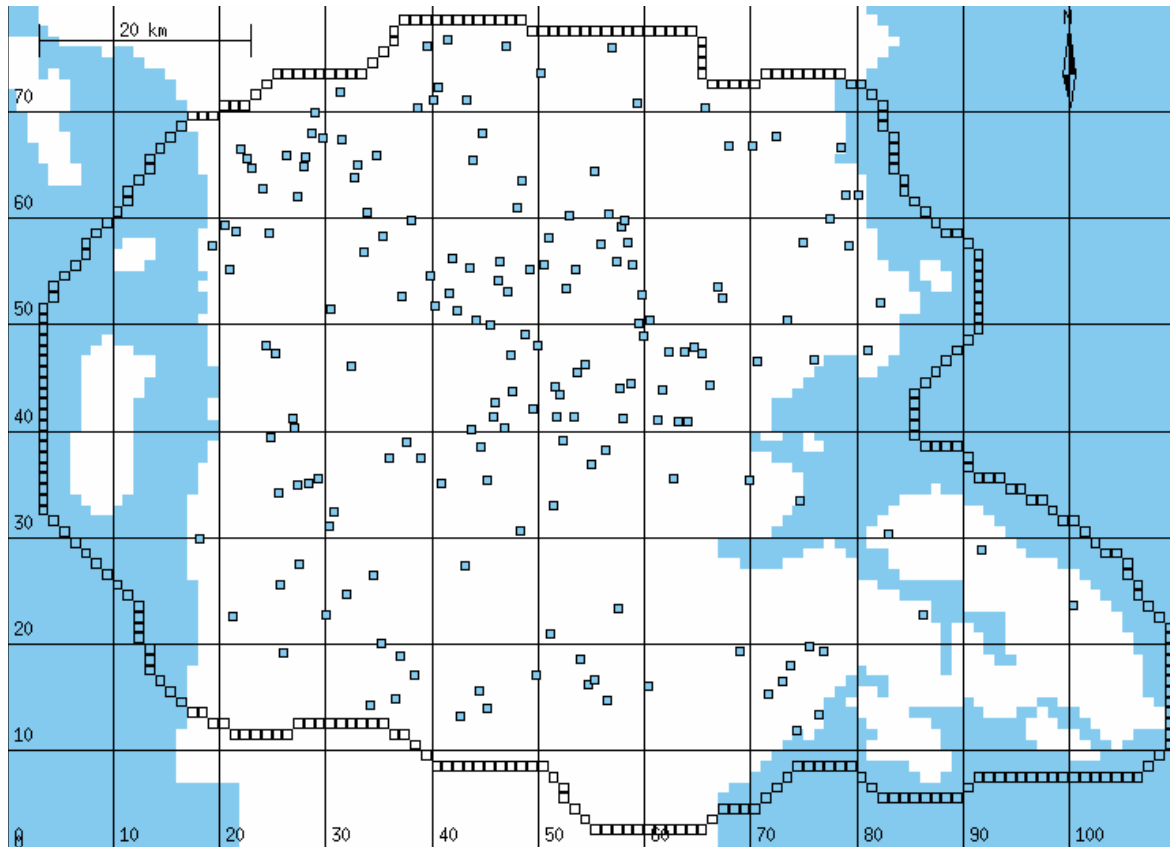
Ovenstående procedure resulterede i udvælgelse af 1221 observationsværdier fordelt på de 16 beregningslag. Densiteten af data er størst i de øverste beregningslag og falder signifikant med dybden, se tabel 1. Der er således kun 6 observationer til rådighed i lag 16, som er beliggende mellem kote -180 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 markvandingsboringer.

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



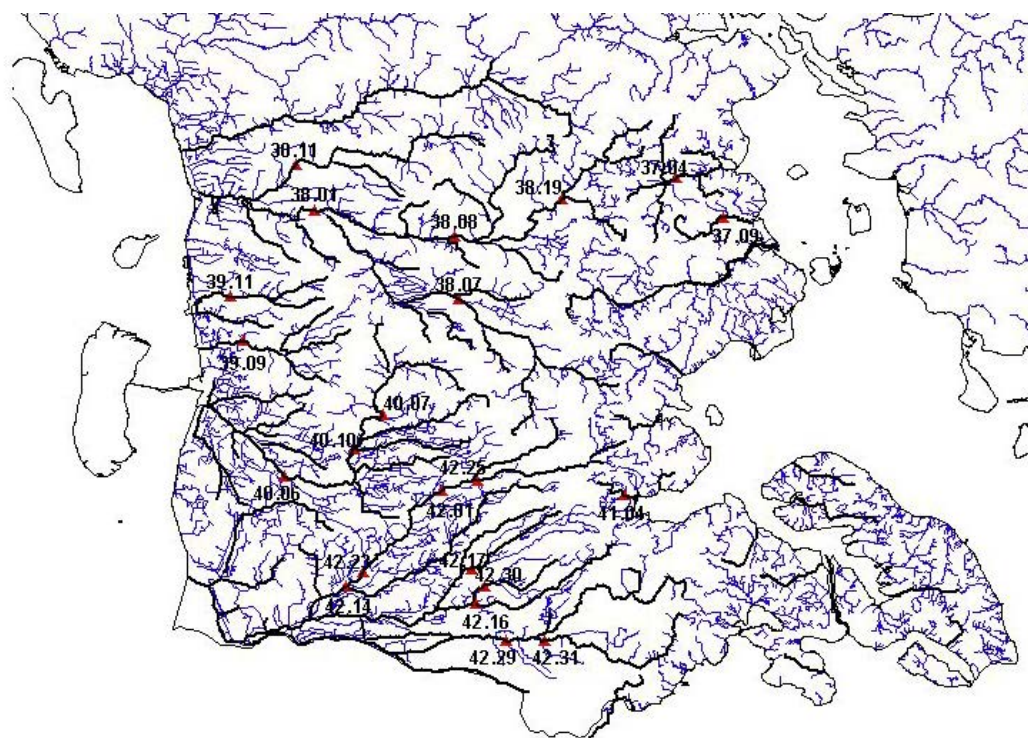
Figur 1 Placering af udvalgte boringer med filtersætning i beregningslag 3.

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. Medianminimums-estimerne 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 regressionsmæssig sammenhæng angiver $n + m - P$ antallet af frihedsgrader. Når samtlige modelfejl er elimineret og kun observationsfejl rester, 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 standardafvigelse.

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.

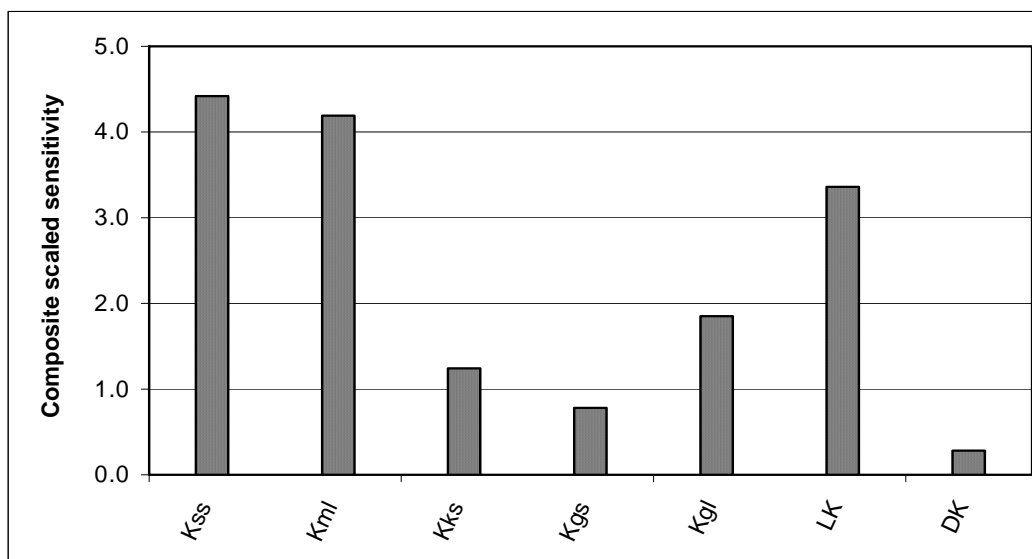
Udvælgelsen af kalibreringsparametre baseres i nærværende sammenhæng på en sensitivitetsanalyse (Hill, 1998), hvor der foruden de fem hydrauliske ledningsevner indgår vandløbslækagekoefficient og drænkoefficient. Ingen af de to sidstnævnte parametre er distribueret. Resultatet af analysen ses i figur 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 sensitivitetens værdi 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.

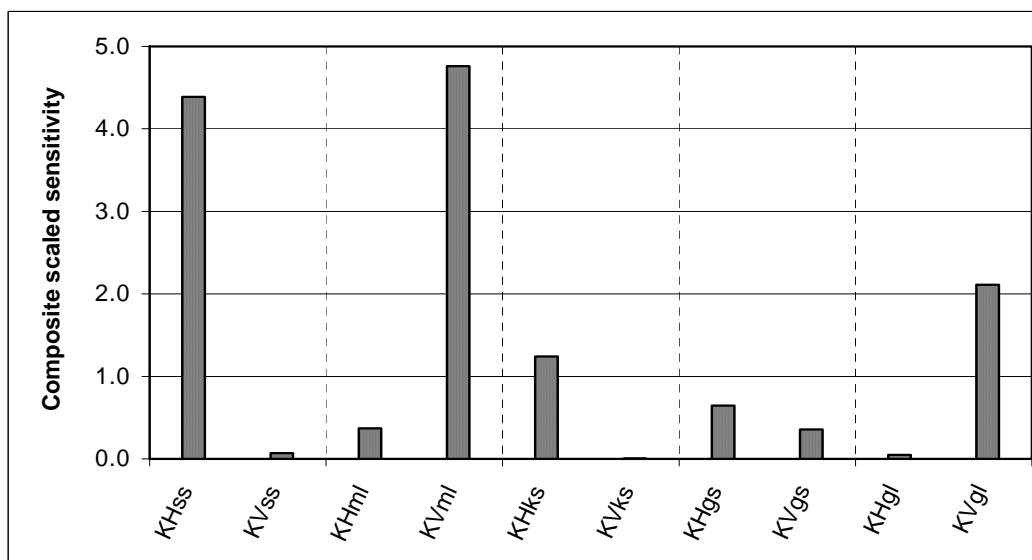
Baseret på resultaterne af sensitivitetsanalysen vælges det at inkludere de fem hydrauliske ledningsevner samt vandløbslækagekoefficienten i kalibrering af modellen.

For at kunne vurdere, hvordan hhv. den horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevne influerer på resultaterne, er der desuden foretaget en sensitivitetsanalyse 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 (moræneler, 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 initiale 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 parameters værdi. De anslåede minimums- og maksimumsværdier for hydraulisk ledningsevne er fastsat på baggrund af Harrar and Henriksen (1996) og PALAEUX (1999). Mht. vandløbslækagekoefficienten har der i tidligere modelarbejder, hvor vand-

udvekslingen 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	Initiel 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 udstrømning 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 tryk-randbetingelse, hvor trykniveauet i randelementerne blev fastlagt ud fra interpolation af trykniveauobservationer fra Jupiter databasen.

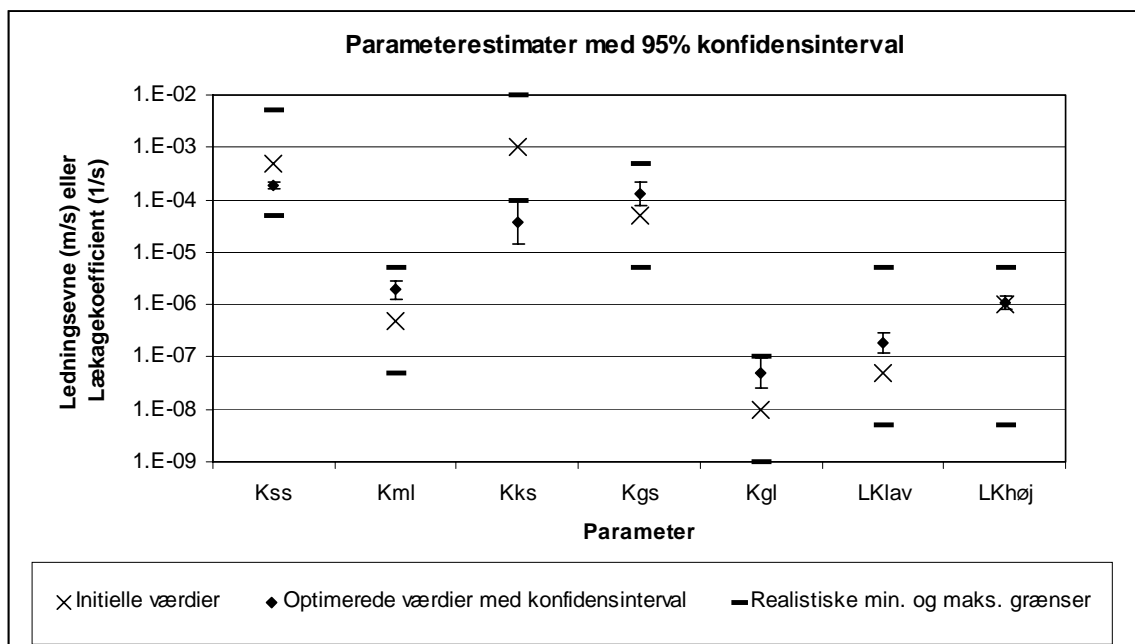
B.6 KALIBRERINGSRESULTAT

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 parameterværdier 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.	2.2·10 ⁻⁴	2.8·10 ⁻⁶	1.0·10 ⁻⁴	2.6·10 ⁻⁴	9.3·10 ⁻⁸	2.9·10 ⁻⁷	1.5·10 ⁻⁶
Estimat	1.9·10 ⁻⁴	1.9·10 ⁻⁶	3.7·10 ⁻⁵	1.3·10 ⁻⁴	4.8·10 ⁻⁸	1.9·10 ⁻⁷	1.1·10 ⁻⁶
Nedre 95% K.I.	1.7·10 ⁻⁴	1.3·10 ⁻⁶	1.4·10 ⁻⁵	7.9·10 ⁻⁵	2.5·10 ⁻⁸	1.2·10 ⁻⁷	8.3·10 ⁻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 parameterværdier 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 estimeret 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 indikerer 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; R² = 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 simuleringresultater, 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%	-	-

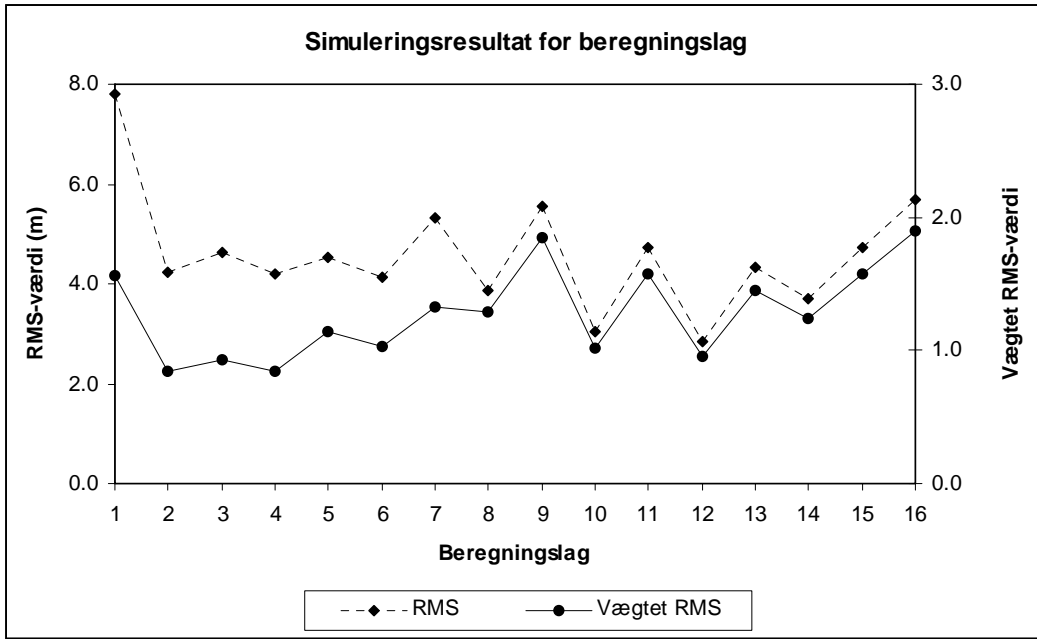
B.6.3 Hydraulisk trykniveau

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/ ΔH er på 7% og derved mindre end kalibreringskriteriet på 10%, vurderes præcisionen at være acceptabel.

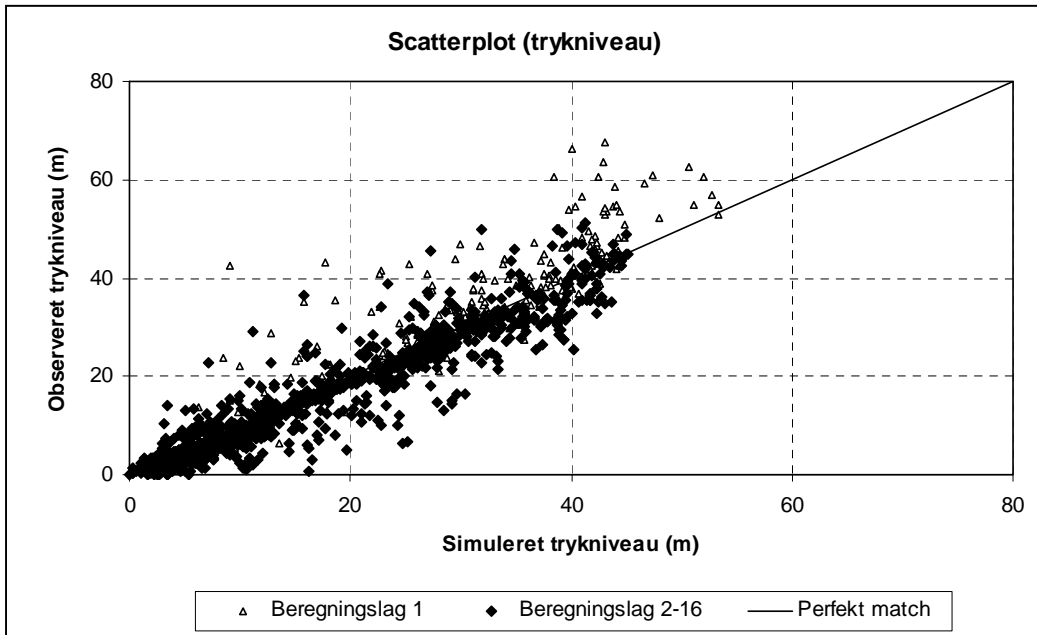
I figur 6 ses hhv. RMS-værdien og RMS-værdien skaleret med standardafvigelsen på trykniveauobservationerne (vægtet RMS-værdi) for hvert af de 16 beregningslag. RMS-værdien for beregningslag 1 skiller sig ud fra de øvrige, idet der her opnås en værdi på næsten 8 m. Denne store spredning skyldes, at beregningslag 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 afgangsværdier 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.

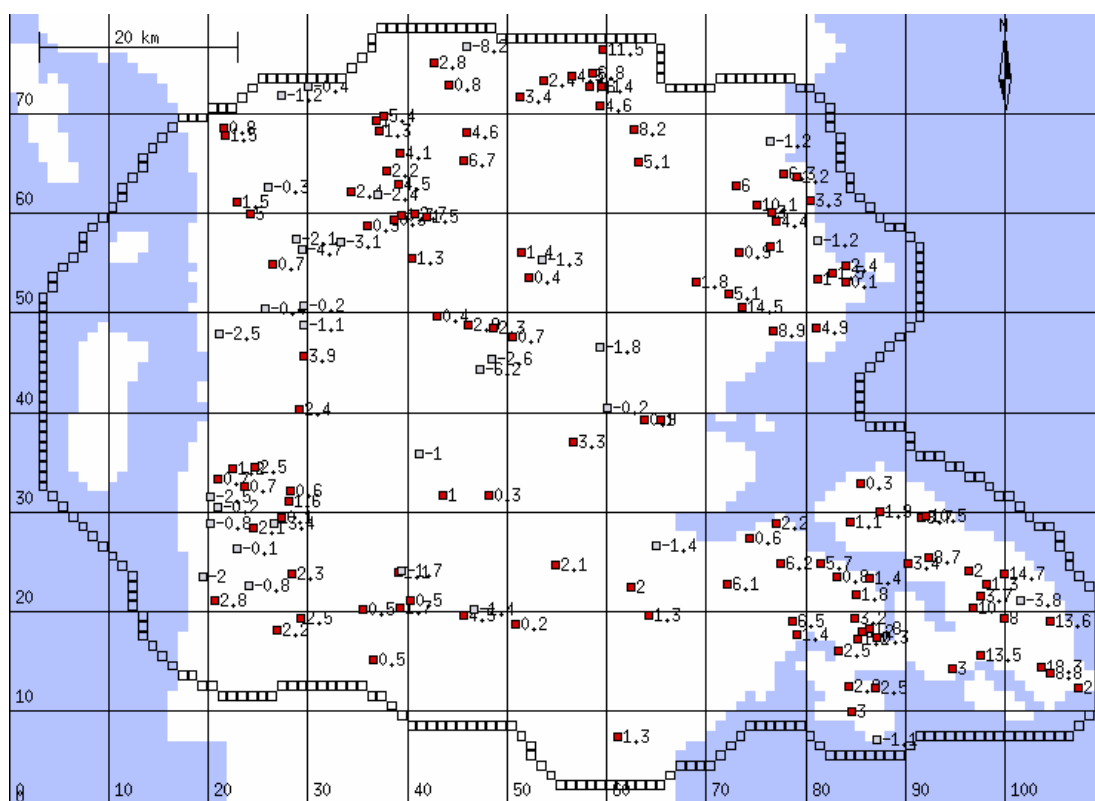
Den rumlige fordeling af residualerne er generelt også rimelig. Som eksempel er residualerne for beregningslag 5 vist i figur 9. I den østligste del af modelområdet (på Als) ses en tendens til systematisk underestimation af trykniveauet, mens der i det øvrige område er en acceptabel fordeling af residualerne.



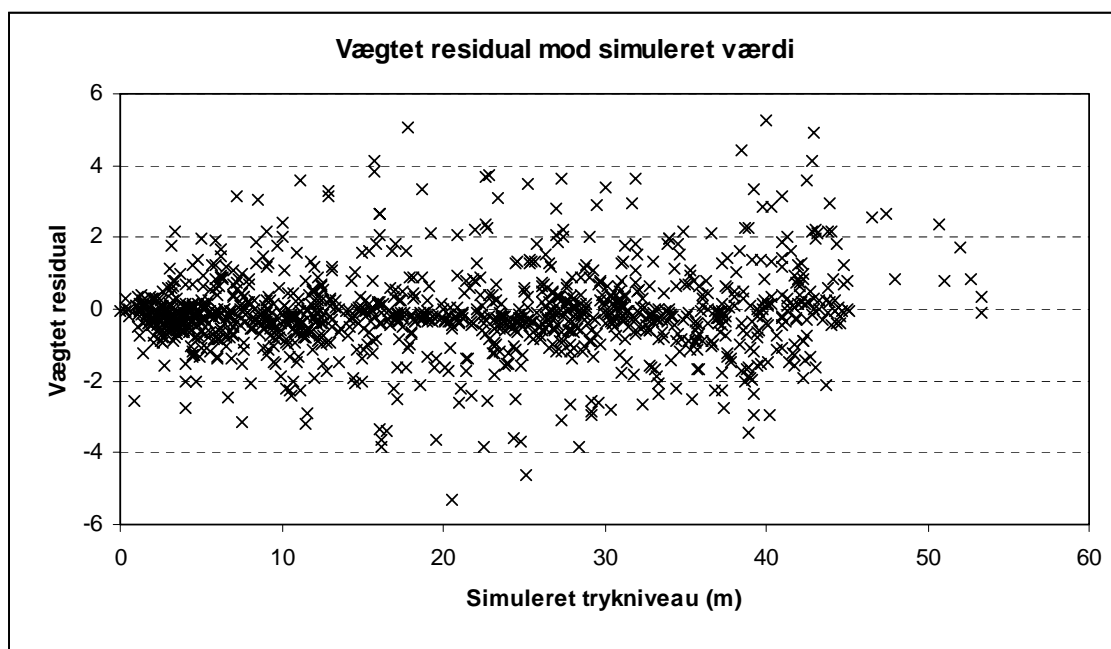
Figur 6 RMS-værdi for de enkelte beregningslag og RMS-værdi normeret med standardafvigelse for det pågældende beregningslag (se tabel 2).



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.

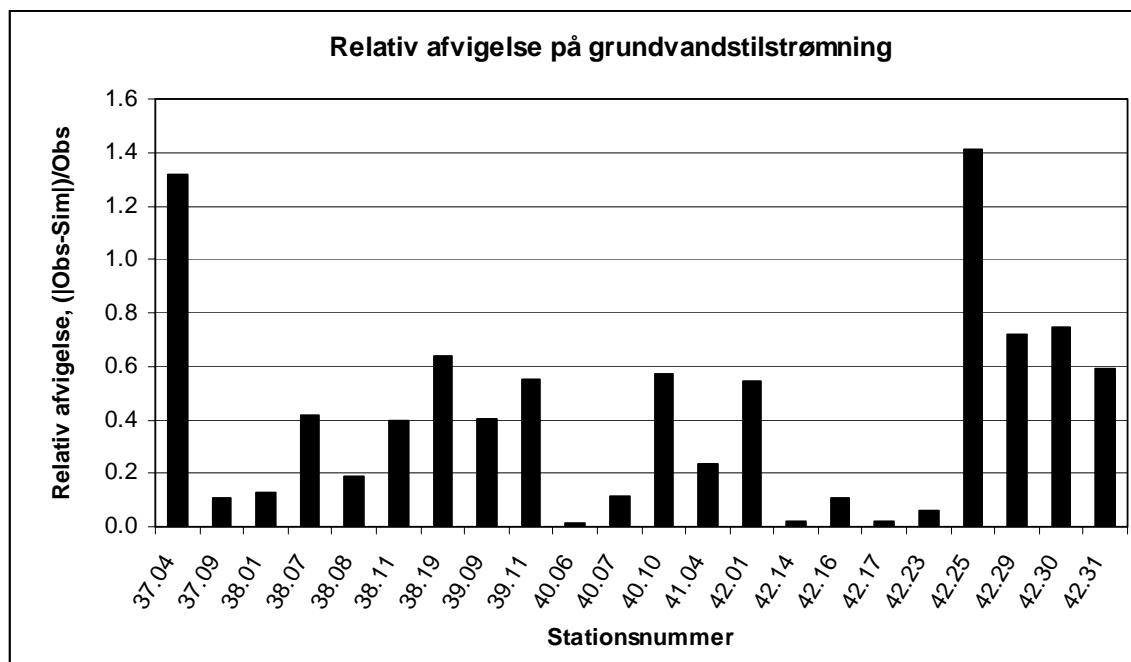
B.6.4 Grundvandstilstrømning til vandløb

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 skræppe 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).

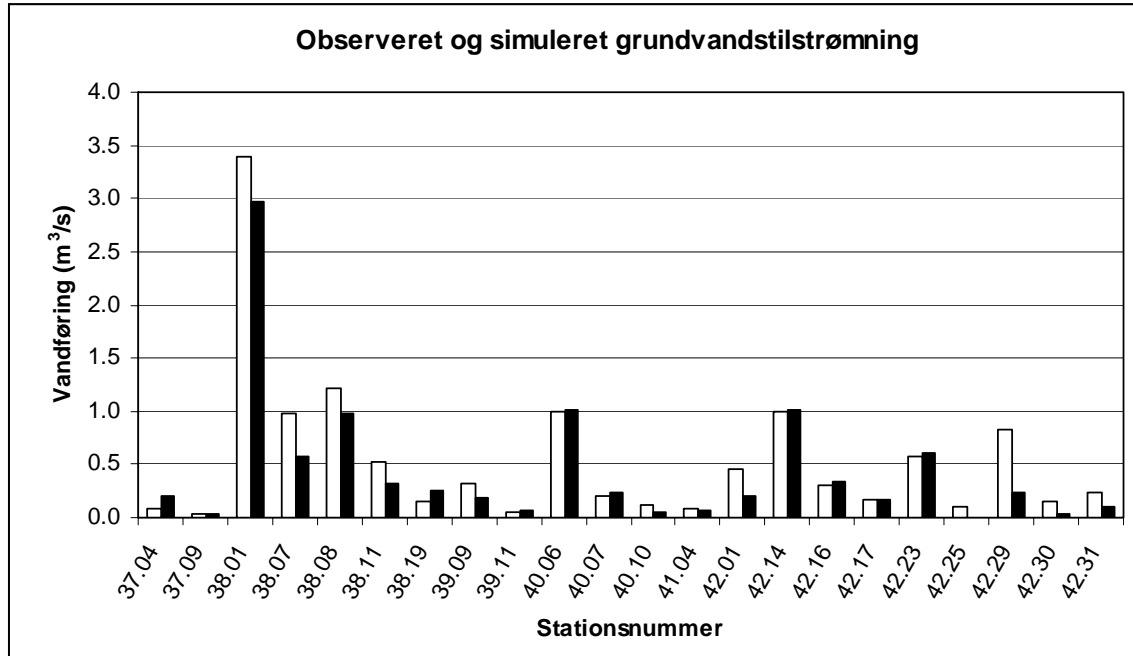
Der simuleres generelt for lav grundvandstilstrømning til vandløbene (jf. ME = 17%). For station 42.25 simuleres der desuden en beskeden udstrømning fra vandløbet til grundvandsmagasinet. Begge resultater kan til en vis grad tilskrives simuleringen af for lave trykniveauer i de tilgrænsende magasiner. 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.

En mere detaljeret distribuering af vandløbslægekoefficienten 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.



Figur 11 Observeret (□) og simuleret (■) grundvandstilstrømning ved de 22 vandføringsstationer.

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 Danmarksmodel. Distribuerede fordelinger af hydraulisk ledningsevne og vandløbslægekoefficient 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 vandløbslægekoefficienter.

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 trykniveau-

fordelingen 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.