

Retningslinier for opstilling af grundvandsmodeller

Hans Jørgen Henriksen, Torben Sonnenborg, Heidi Barlebo
Christiansen, Jens Christian Resgaard, Bill Harrar og Per
Rasmussen
Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse

Adam Brun
DHI - Institut for Vand og Miljø

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling.

Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter.

Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

Indhold

SAMMENFATNING OG KONKLUSIONER	3
SUMMARY AND CONCLUSIONS	5
1 INTRODUKTION	6
2 TERMINOLOGI OG MODEL CYKLUS	9
2.1 INDLEDNING	9
2.2 TERMINOLOGI OG MODEL CYKLUS	9
2.3 MODEL PROTOKOL	13
2.4 PARTER OG ROLLEFORDELING	15
2.4.1 De forskellige parters ansvar	15
2.4.2 Situationen i Danmark i dag	17
3. FORSLAG TIL DANSKE RETNINGSLINIER FOR STRØMNINGSMODELLER	19
3.1 GENERELLE RETNINGSLINIER	20
3.2 RETNINGSLINIER FOR OPSTILLING AF HYDROGEOLOGISK TOLKNINGSMODEL (MILEPÆL 1)	22
3.3 RETNINGSLINIER FOR MODELOPSTILLING OG NØJAGTIGHEDSKRITERIER (MILEPÆL 2)	25
3.4 RETNINGSLINIER VEDR. MILEPÆL 3 – KALIBRERING OG VALIDERING	32
3.5 RETNINGSLINIER VEDR. MILEPÆL 4 – MODELSIMULERINGER OG USIKKERHEDSANALYSE	40
4. RETNINGSLINIER OM STOFTRANSPORTMODELLERING	44
4.1 INDLEDNING	44
4.2 FORMÅL OG DEFINITIONER AF BEGREBER	44
4.3 HVAD DÆKKER BEGREBERNE PARTIKELBANE- OG STOFTRANSPORTMODELLERING OVER?	45
4.3.1 Partikelbane modellering	45
4.3.2 Stoftransportmodellering	46
4.3.3 Sammenligning af metoderne	46
4.4 REAKTIV STOFTRANSPORTMODELLERING	47
4.5 TRANSPORTMODELLERING, HVOR GRUNDVANDSSTRØMNINGEN PÅVIRKES AF STOFFERNE	47
4.6 ANVENDELSESOMRÅDE	47
4.7 RETNINGSLINIER FOR ANVENDELSE AF TRANSPORTMODELLER	47
4.8 SPECIFIKKE FORHOLD VED PROTOKOL I FORBINDELSE MED TRANSPORTMODELLERING	48
4.8.1 Definition af modellformål	48
4.8.2 Konceptuel model	48
4.8.3 Valg af kode	49
4.8.4 Test af kode	52

4.8.5 Modelopsætning	52
4.8.6 Nøjagtighedskriterier	54
4.8.7 Modelkalibrering	55
4.8.8 Validering	56
4.8.9 Usikkerhedsvurdering	57
4.8.10 Simuleringsscenarier	57
4.8.11 Rapportering	57
4.8.12 Postaudit	58
5 LITTERATUR	59
APPENDIX A: KVANTITATIVE KALIBRERINGSKRITERIER	63
APPENDIX B: ERFARINGER FRA UDLANDET	65
B.1 ASTM RETNINGSLINIER	67
B.2 USGS, US ARMY CORPS OF ENGINEERING OG ENKELTE STATERS RETNINGSLINIER	68
B.3 ERFARINGER FRA INTERNATIONALE WORKSHOPS OG KONFERENCER	69
<i>B.3.1 ModelCare konferencen i 1999</i>	69
<i>B.3.2 MODFLOW konferencen i 1998</i>	70
APPENDIX C: GRUPPERING AF UDENLANDSKE ERFARINGER EFTER MILEPÆLE I MODELLERINGSPROCESSEN	71
C.1 OPSTILLING AF KONCEPTUEL MODEL	71
C.2 VALG AF MODELKODE, MODELOPSÆTNING OG FASTLÆGGELSE AF NØJAGTIGHEDSKRITERIER	75
C.3 MODELKALIBRERING OG -VALIDERING	77
C.4 MODELSIMULERING OG USIKKERHEDSANALYSE	78
APPENDIX D: BESKRIVELSE AF ERFARINGER MED MODELDATABASE FOR KØBENHAVNSOMRÅDET OG NATIONAL VANDRESSOURCEMODEL	80
D.1 ERFARINGER MED MODELDATABASE FOR KØBENHAVNSOMRÅDET	80
D.2 ERFARINGER MED NATIONAL VANDRESSOURCE MODEL	81
APPENDIX E: SAMMENLIGNING AF FORSKELLIGE MODELKODER	83
E.1 BRUGERINTERFACE OG MODELKODE	83
E.2 ANBEFALINGER VEDR. VALG AF KODE OG BRUGERINTERFACE	85

Sammenfatning og konklusioner

Der er opstillet retningslinier for strømningssmodellering med udgangspunkt i en modelprotokol, der i brede kredse - også i udlandet - er enighed omkring. En vigtig "livline" eller "rød tråd" i et modelprojekt er tilvejebringelsen af en god og konstruktiv dialog mellem på den ene side rekvirenten og på den anden side rådgiveren. Det anbefales af hensyn til sikring af en sådan dialog og konsensus at gennemføre modelreviews på de tidspunkter i processen, hvor dette er særligt påkrævet. Ved passagen af følgende milepæle i modelleringsprocessen vurderes dette særligt påkrævet:

- opstilling af konceptuel model
- modelopstilling og fastsættelse af nøjagtighedskriterier
- kalibrering og validering
- simuleringer og usikkerhedsanalyse

På enkelte områder vurderes det nuværende grundlag for udarbejdelse af præcise retningslinier for grundvandsmodellering utilstrækkelige. Specielt vurderes der at være et stort behov for indsamling af flere erfaringer omkring de modelbaserede analyser der nødvendigvis skal udføres i forbindelse med det sidste trin i zonerings "dimensionering af indsatsplanerne" (svarende til trin 4 jf. Miljøstyrelsens vejledning i zonerings). Følgende elementer er i dag enten utilstrækkeligt belyst eller usikre:

- fastsættelse af nøjagtighedskriterier (kalibrering / validering),
- metoder til kvantificering af usikkerheder (herunder betydningen af yderligere dataindsamling),
- anvendelse af stoftransportmodeller (udvaskning fra rodzonen, umættet og mættet zone), og
- cost/benefit- og risikoanalyser (f.eks. indsamling af nye / yderligere feltdata, udgifter til reguleringer af fladebelastning/punktkilder, design af monitoringssystemer og risiko ved forurening).

Det anbefales derfor, at de opstillede retningslinier bliver ajourført i løbet af et par år. I takt med at der indsamles et bedre erfaringsgrundlag fra ind- og udland på såvel grundvandsområdet, som for andre dele af vandkredsløbet.

Nærværende rapport har mht. stoftransportmodeller bl.a. haft som formål at beskrive, hvorvidt den metodik, der anvendes i forbindelse med opstilling af en strømningssmodel, også er direkte anvendelig ved transportmodellering. Med baggrund i den eksisterende litteratur samt en gennemgang af de enkelte delelementer ved en grundvandsmodellering er det opfattelsen, at den metodik, der forslås anvendt ved grundvandsmodellering, også udmærket kan omfatte transportmodellering, dog med enkelte tilføjelser specifikt rettet mod transportmodellering.

Der er således fortsat et aspekt omkring reaktiv modellering, som ikke er klart belyst i gennemgangen af stoftransportmodeller i nærværende rapport. Hvor man ved traditionel strømningssmodellering og konservativ stoftransport arbejder med de samme ligningssystemer, er det ved reaktiv modellering typisk op til modelløren at formulere de processer, som måtte påvirke stoffet under transporten gennem grundvandsmagasinet. Med baggrund i den store variation, der er i procesbeskrivelser rapporteret i litteraturen - endda for den samme proces - synes det nødvendigt at håndtere dette forhold separat.

Det skal derfor anbefales, at det videre arbejde med retningslinier for stoftransportmodellering foregår i to regier. Det ene omhandler tilføjelser til retningslinier for grundvandsmodellering, som vurderes at kunne tage udgangspunkt i beskrivelsen i afsnittet om disse modeller (kapitel 4 i nærværende rapport). Det andet omhandler specifikke retningslinier ved reaktiv stoftransportmodellering. Her bør der udarbejdes separate retningslinier.

Summary and conclusions

Guidelines for groundwater flow modeling are proposed based upon modeling protocol that is widely accepted by the international hydrological community. The guidelines provide a framework within which issues relevant to model development, calibration, testing and predictive simulations should be conducted and reported. The guidelines can also be used to promote constructive dialog between the client and the consultant by clearly identifying up-front the issues most important to the modeling process. It is recommended that a series of meetings take place during the modeling study to review progress and milestones in the following areas:

- Conceptual model development
- Model setup and determination of calibration criteria
- Calibration and validation
- Simulations and uncertainty analysis

It is difficult to establish guidelines for all aspects of modeling due to lack of consensus or standard best practices. Further development of the modeling guidelines is dependent upon the need for better theoretical understanding and practical experience in the following areas:

- Determination of performance criteria (required accuracy for calibration and validation)
- Uncertainty analysis (data needs, methods for the quantification of uncertainty)
- Application of solute transport models
- Risk and cost-benefit analysis

It is recommended that the proposed guidelines be reviewed and updated within the next couple of years in anticipation of development in these areas.

These guidelines can to a large extent be applied to solute transport modeling in relatively simple, advective-dominated systems. However, the guidelines are not applicable to systems where solute transport is governed by complex chemical and biological processes. For example, the processes governing the transport of reactive solutes are not well understood. Therefore it is difficult to establish modeling guidelines for reactive transport when the fundamental conceptual and mathematical models describing relevant processes need further development.

1 Introduktion

Nærværende rapport behandler behovet for retningslinier for anvendelse af numeriske grundvandsmodeller. Rapporten skal opfattes som en baggrundsrapport, som grundlag for udarbejdelse af en egentlig vejledning på området, på et senere tidspunkt. I undersøgelsen gives eksempler på udenlandske og danske erfaringer med retningslinier i forbindelse med:

- regionale vurderinger af grundvandsressourcens størrelse under hensyn til klimavariationer og vandløbspåvirkning ved hjælp af hydrologiske modeller
- grundvandsmodellering i forbindelse med detailkortlægning og zoner i områder med særlige drikkevandsinteresser eller i oplande til kildepladser/vandværker med henblik på vurdering af grundvandsdannende oplande, strømningsveje mv.
- brug af grundvandsmodeller i forbindelse med detaljerede indsatsplaner (f.eks. nitrat) til konsekvensvurderinger af reguleringer af nitratudvaskning eller vurdering af forureningsudbredelse fra punktkilder og stoftransport

Målgruppen for denne rapport er folk i amter, kommuner, vandværker, centrale myndigheder, rådgivere og forskningsinstitutioner der deltager i rekvirering eller udførelse af grundvandsmodelprojekter.

Der er opstillet retningslinier for strømningsmodellering med udgangspunkt i en modelprotokol, som der i brede kredse også i udlandet, er generel enighed om.

Der gives desuden retningslinier i forbindelse med anvendelse af stoftransportmodeller, men dette emne er kun behandlet i mere begrænset omfang, idet der ikke er den samme konsensus om brugen af stoftransportmodeller, som der er når det gælder strømningsmodeller. Det har ikke været muligt at opstille egentlige retningslinier for stoftransportmodellering.

I de seneste år er der rettet betydelig fokus på fastlæggelse af nøjagtighedskriterier, kalibrering, validering og usikkerhedsanalyse, måske fordi nogen af de simuleringsresultater, som grundvandsmodeller i første omgang kom ud med, senere viste sig ikke at være tilstrækkeligt troværdige og holdbare under alle forhold og påvirkninger af det hydrologiske system. Der skal ikke være nogen tvivl om, at der er behov for fortsat at arbejde videre med disse spørgsmål, og at netop disse emner er meget centrale i et modelprojekt. På en række punkter mangler der dog viden til at kunne anviser klare retningslinier.

Et særligt vigtigt forhold i et modelprojekt er tilvejebringelsen af en god og konstruktiv dialog mellem på den ene side rekvirenten og på den anden side

rådgiveren. Det er herunder vigtigt at gennemføre modelreviews på de tidspunkter i processen, hvor dette er særligt påkrævet.

I forbindelse med opstilling af retningslinierne er der indsamlet litteratur og erfaringer fra udlandet bl.a. USA, England og Australien. Danske erfaringer fra modeldatabase for Københavnsområdet, den Nationale Vandressource Model og Ståbi i grundvandsmodellering udarbejdet i forbindelse med et grundkursus for amtsfolk er også søgt inddraget (Ståbi i grundvandsmodellering kan hjemtages fra www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).

På nogle områder er der behov for at opbygge viden og sammenstille praktiske erfaringer med henblik på opstilling af mere præcise retningslinier. Det gælder specielt vedrørende:

- fastsættelse af nøjagtighedskriterier (kalibrering/validering),
- metoder til kvantificering af usikkerheder (herunder betydningen af yderligere dataindsamling),
- anvendelse af stoftransportmodeller (udvaskning fra rodzonen, umættet og mættet zone), og
- cost/benefit- og risikoanalyser (f.eks. indsamling af nye/yderligere feltdata, udgifter til reguleringer af fladebelastning/punktkilder, design af monitoringssystemer og risiko ved forurening).

De opstillede retningslinier bør derfor ajourføres i løbet af nogle år i takt med, at der indsamles et bedre erfaringsgrundlag fra ind- og udland på såvel grundvandsområdet, som gældende for andre dele af vandkredsløbet.

Grundlaget for nærmere retningslinier for brug af grundvandsmodeller i forbindelse med detaljerede indsatsplaner (f.eks. for nitrat) til konsekvensvurderinger af reguleringer af nitratudvaskning eller vurdering af forureningsudbredelse fra punktkilder og stoftransport er af samme årsag i nærværende rapport ikke nærmere behandlet, idet der er behov for at gøre erfaringer på dette område fra f.eks. zoneringsen, før der opstilles præcise retningslinier.

De opstillede retningslinier med opdeling på 4 milepæle er dog tilstrækkeligt brugbare og rummelige, som en ramme for arbejdet med grundvandsmodeller på såvel de mere traditionelle opgavetyper, som når det gælder mere integrerede modeller eller stoftransportmodeller. De 4 milepæle er:

- opstilling af konceptuel model
- modelopstilling og fastlæggelse af nøjagtighedskrav
- kalibrering og validering
- modelsimuleringer og usikkerhedsanalyser

Det anbefales at gennemføre formaliserede reviews ved passagen af hver enkelt milepæl, evt. med eksterne personer/modellører, med henblik på at der opnås enighed mellem vandressourceforvalteren (rekvirenten) og rådgiveren (modelløren) omkring dels de opnåede resultater ved passagen af den aktuelle

milepæl og dels indholdet i den/de kommende faser af opgaven. Herved er det også muligt at træffe beslutninger om evt. behov for yderligere dataindsamling eller afbrydelse af modelarbejdet, såfremt der enten ikke kan opnås enighed om resultaterne eller såfremt det viser sig at de opstillede formål ikke vil kunne opnås, f.eks. med hensyn til nøjagtighedskrav, på det nuværende datagrundlag.

Det endelige sæt retningslinier er udarbejdet på baggrund af de forslag og kommentarer, som er fremkommet ved skriftelig høring af udkastet i perioden 11. december 2000 til 8. januar 2001. Udkastet til høringsrapport er udarbejdet i perioden april – december 2000.

Projektets styregruppe har bestået af følgende deltagere:

Martin Skriver, Miljøstyrelsen (formand)
Kim Dahlstrøm, Miljøstyrelsen (projektdeltager)
Hans Jørgen Henriksen, GEUS (projektleder)
Heidi C. Barlebo, GEUS (projektdeltager)
Per Rasmussen, GEUS (projektdeltager)
Bill Harrar, GEUS (projektdeltager)

2 Terminologi og modelcyklus

2.1 Indledning

Numeriske grundvandsmodeller, som beskriver strømning og stoftransport, anvendes i stigende omfang som værktøjer, der kan medvirke til en bedre forståelse og dermed forvaltning af grundvandsressourcen.

Grundvandsmodeller bruges således i et stigende omfang af amterne i forbindelse med detailkortlægning og zoner, bl.a. til (a) overordnede regionale grundvandsmodeller (inkl. overflademoduler), (b) detaljerede grundvandsmodeller dvs. strømningsmodeller og partikelbanemodeller og (c) vurdering af effekter af etablering af beskyttelseszoner (f.eks. nitrat).

Numeriske modeller har begrænsninger i deres anvendelighed som følge af, at de repræsenterer en forenkling af det virkelige fysiske system. Fokus i forskerkredse har i de seneste år i høj grad været rettet mod udvikling af forbedrede og mere brugervenlige modelkoder samt i studier af detailprocesser. Det har resulteret i en bedre forståelse af de grundlæggende processer og i bedre modelværktøjer. Det har imidlertid ikke i sig selv resulteret i forbedrede resultater i praktiske anvendelser.

Hos vandressourceforvalterne (amter og vandværker) har der samtidig i stigende grad udviklet sig en praksis med (pris)konkurrence blandt rådgivere på mange af modelstudierne. Opmærksomheden på nødvendigheden af at dokumentere modelresultater, herunder at beskrive modelbegrænsninger og usikkerheder, er derimod ikke fulgt med i samme takt. Kun enkelte forskere og brugere arbejder indenfor dette område. Resultatet har været en del frustrationer med modelstudier, som ikke svarede til forventningerne hos vandressourceforvalterne.

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

2.2 Terminologi og modelcyklus

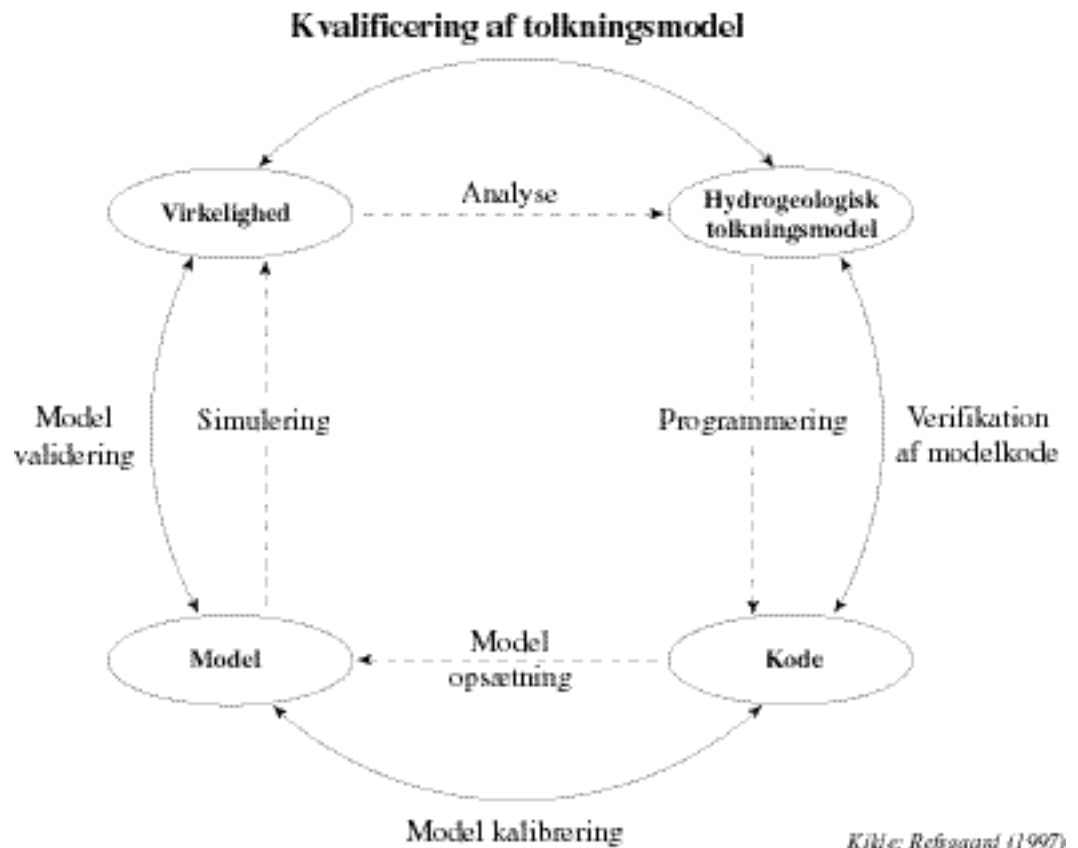
Definition af en terminologi vil uundgåelig afspejle en metodikopfattelse. Nærværende forslag til terminologi og metodik stammer ikke fra en enkelt,

men fra en sammenstilling og modifikation af flere kilder: Schlesinger et al (1979), Anderson and Woessner (1992), Refsgaard (1996) og Henriksen (1997). Terminologien i Tabel 2.1 er baseret på en idealiseret opfattelse af en modelcyklus som skitseret på Fig. 2.1, hvor simuleringsituationen 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 2.1 Definition af terminologi

<i>Eksekverbar kode</i>	Fil indeholdende kildeteksten oversat til computersprog. Denne fil aktiveres for at køre programmet. En eksekverbar kode kan ikke redigeres.
<i>Fysiske system</i>	Det naturlige system, dvs. i dette tilfælde grundvandssystemet.
<i>Følsomhedsanalyse</i>	Analyse af simuleringsresultaternes følsomhed overfor ændringer i kalibreringsparametre og andre modelantagelser, f.eks. randbetingelser, hydrauliske parametre og tolkning af geologien. Ved en følsomhedsanalyse analyseres følsomheden overfor den enkelte usikkerhedskilder enkeltvis.
<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>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>Input variabel</i>	Input data som varierer i tid (tidsserier), f.eks. data for klimaforhold eller oppumpninger
<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>Kildetekst til modelkode</i>	Computerprogrammets tekst/software kode hvor alle kommandoerne for beregningerne står skrevet. En kildetekst kan redigeres.
<i>Model</i>	En numerisk model indeholdende konkrete inputdata og modelparametre tilpasset et bestemt område.

<i>Model kalibrering</i>	Tilpasning af parameterværdier, så modellen kan reproducere givne feltdata inden for specificerede nøjagtighedsgrænser.
<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>Nøjagtighedskriterium</i>	Et numerisk mål for overensstemmelsen mellem en modelsimulering og observerede feltdata. Benyttes som mål i kalibrerings og valideringsprocedurer.
<i>Opsætning af model</i>	Etablering af en model til den ønskede anvendelse inden for en acceptabel nøjagtighed.
<i>Parameter</i>	En fysisk størrelse som forudsættes at være konstant i tid, f.eks. hydraulisk ledningsevne eller magasintal. Parametre beskriver et systems fysiske karakteristika.
<i>Postaudit</i>	Vurdering af tidligere prediktioner på et tidspunkt, hvor der er fremskaffet flere data, f.eks. nogle år senere.
<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>Tilstandsvariabel</i>	Intern variabel, f.eks. vandindhold i den umættede zone eller trykniveau i et givet punkt i et grundvandsmagasin.
<i>Usikkerhedsanalyse</i>	Systematisk analyse af forskellige usikkerhedskilder (f.eks. klimadata, hydrauliske parametre og geologiske tolkninger) og deres samlede indflydelse på usikkerheden af simuleringresultaterne.
<i>Validering af model</i>	Dokumentation for at en model kan beskrive virkeligheden med en tilfredsstillende nøjagtighed.
<i>Variabel</i>	En fysisk størrelse som varierer i tid. Variable kan opdeles i input variable, som beskriver eksterne størrelser, og interne tilstandsvariable.
<i>Verifikation af modelkode</i>	Dokumentation for at en modelkode løser de givne ligninger med en specificeret nøjagtighed.



Figur 2.1 Elementer i model terminologi og deres indbyrdes sammenhænge

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

Det er vigtigt at bemærke, at nøjagtighedskriterier og gyldighedsområder, som i princippet skal opstilles for en konceptuel model, en modelkode og en 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 nøjagtighedskriterie vil være gyldig i visse geografiske områder og til visse formål.

2.3 Modelprotokol

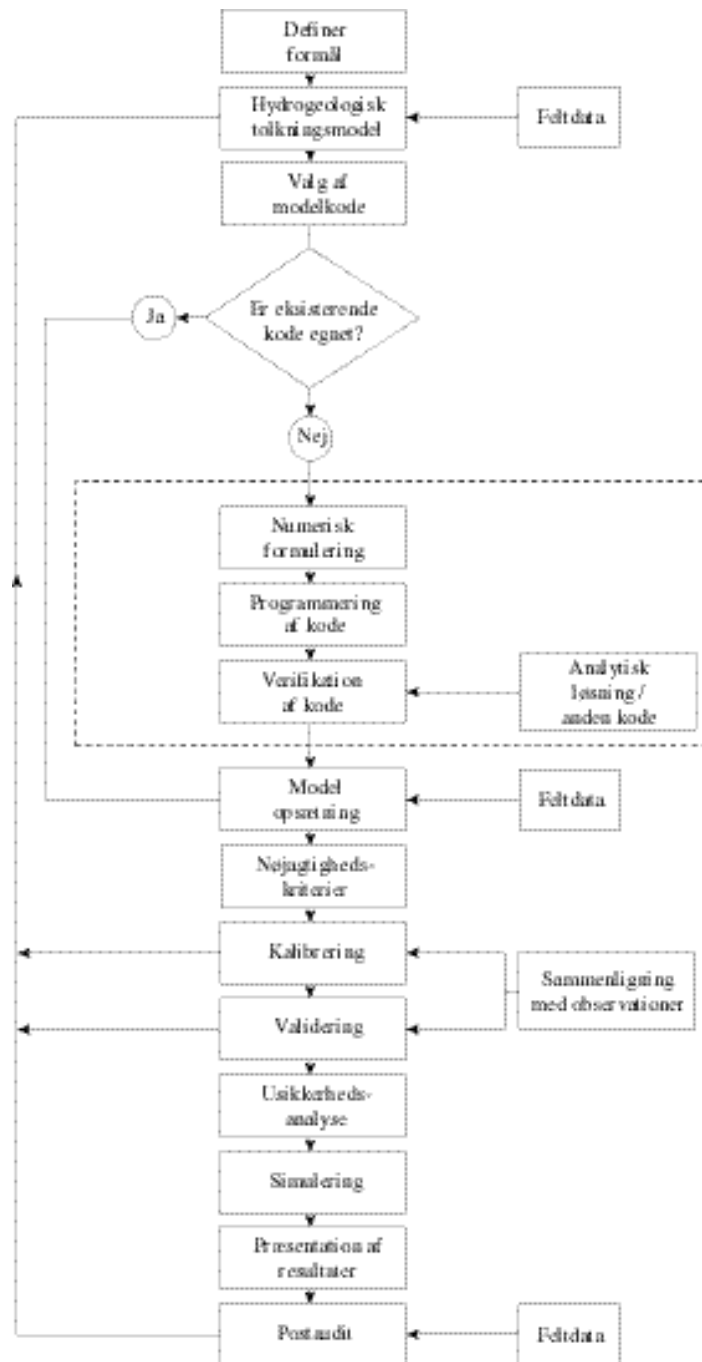
Den følgende procedure for modelanvendelse er en modificeret udgave af den 'modellering protocol' som Anderson and Woessner (1992) foreslog.

Proceduren er illustreret i Fig. 2.2 og beskrevet trin for trin:

1. Det første trin er at *definere formålet* for modelanvendelsen. Et vigtigt element her er at give en første vurdering af den ønskede nøjagtighed af model output.
2. Herefter opstilles en *hydrogeologisk tolkningsmodel (konceptuel model)*, hvilket bl.a. omfatter en geologisk model samt en beskrivelse af, hvilke processer der skal medtages i den efterfølgende numeriske model (f.eks. overfladevandsprocesser, makroporer, densitet, stoftransport, udveksling med vandløb) samt modelafgrænsning og randbetingelser.
3. På baggrund af den konceptuelle model *udvælges* herefter en passende *modelkode*, som er dokumenteret gyldig (verificeret) til beskrivelse af den konceptuelle model.
4. Hvis en passende modelkode ikke eksisterer, kan det være nødvendigt at udvikle ny kode, som så skal *verificeres*.
5. Efter at have valgt kode og indsamlet de nødvendige feltdata skal der foretages en *model opsætning*. Det indebærer at vælge rumlig og tidslig diskretisering, definition af rand- og initialbetingelser samt et første gæt på parameterverdier ud fra feltdata.
6. Herefter skal *nøjagtighedskriterierne*, som ønskes opfyldt i de efterfølgende kalibrerings- og valideringstrin, *fastlægges*. Ved fastsættelsen af disse kriterier skal der tages skyldig hensyn til den under trin 1 formulerede ønskede nøjagtighed og til de realistiske grænser, som de tilgængelige data stiller. Såfremt nøjagtighedskriteriet fastlægges som urealistisk højt, vil det enten være nødvendigt at modificere kriteriet eller at indsamle ekstra data.
7. *Model kalibrering* involverer parameterjusteringer ved en 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.
8. *Model validering* foretages ved at gennemføre test som dokumenterer at den givne model (med de kalibrerede parameterverdier) er i stand til at lave tilstrækkeligt nøjagtige forudsigelser til de ønskede formål. Dette kan indebære, at den kalibrerede model anvendes til forudsigelser på en anden periode og sammenlignes med feltdata, som ikke blev anvendt ved kalibreringen.
9. I tilknytning til modelvalideringen skal der foretages *usikkerhedsanalyser*, således at usikkerhederne på modelberegningerne kvantificeres og beskrives eksplicit. Som en konsekvens heraf kan der nu drages konklusioner om modellens repræsentativitet og begrænsninger med hensyn til konkrete påtænkte modelanvendelser.
10. *Model simulering* er ofte den afsluttende modelanvendelse. Set i lyset af de usikkerheder på modelparametre og måske usikkerhed om fremtidige forhold i oplandet (arealanvendelse, klimaforhold, mv.) bør der foretages

følsomhedsanalyser for at få en fornemmelse af usikkerheden på modelforudsigelserne.

11. *Resultaterne præsenteres* oftest i rapporter. Men andre præsentationsformer såsom animationer og direkte overførsel af dedikerede modeller til slutbrugeren sker også hyppigt.
12. En ekstra mulighed for validering af en model er en såkaldt *postaudit* eller eftervalidering, som udføres flere år efter det egentlige modelstudie når modellens forudsigelser kan vurderes mod nye feltdata. Amerikanske eksempler på postaudit indenfor grundvandsmodellering er beskrevet af Anderson and Woessner (1992). Et dansk eksempel findes i Suså området, hvor Suså modellen oprindeligt var opstillet og kalibreret (men ikke valideret) for perioden 1951-80. Storstrøms Amt og Vestsjællands Amt rekvirerede en egentlig eftervalidering (DHI, 1988), på data fra perioden 1981-87. Postaudit sker i praksis ofte i forbindelse med opfølgende studier.



Kilde: Refsgaard

Fig. 2.2 Procedure for modelanvendelse (model protokol).

2.4 Parter og rollefordeling

2.4.1 De forskellige parters ansvar

Som beskrevet ovenfor er den nuværende situation med hensyn til modelvalidering og anvendelse ikke fuldt tilfredsstillende og kan, teoretisk set, let forbedres. Men som fremhævet af bl.a. Forkel (1996) kan den nuværende situation ikke forbedres blot ved en indsats af forskerne. Det kræver en indsats

fra alle tre parter: kodeudviklere (typisk forskere), modelbrugere (typisk rådgivere) og vandressourceforvaltere (typisk amter og vandværker). De forskellige roller og ansvarsområder for de tre parter er vist i Fig. 2.3 med reference til de forskellige trin i modelproceduren gennemgået i afsnit 2.2 og Fig. 2.2.

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

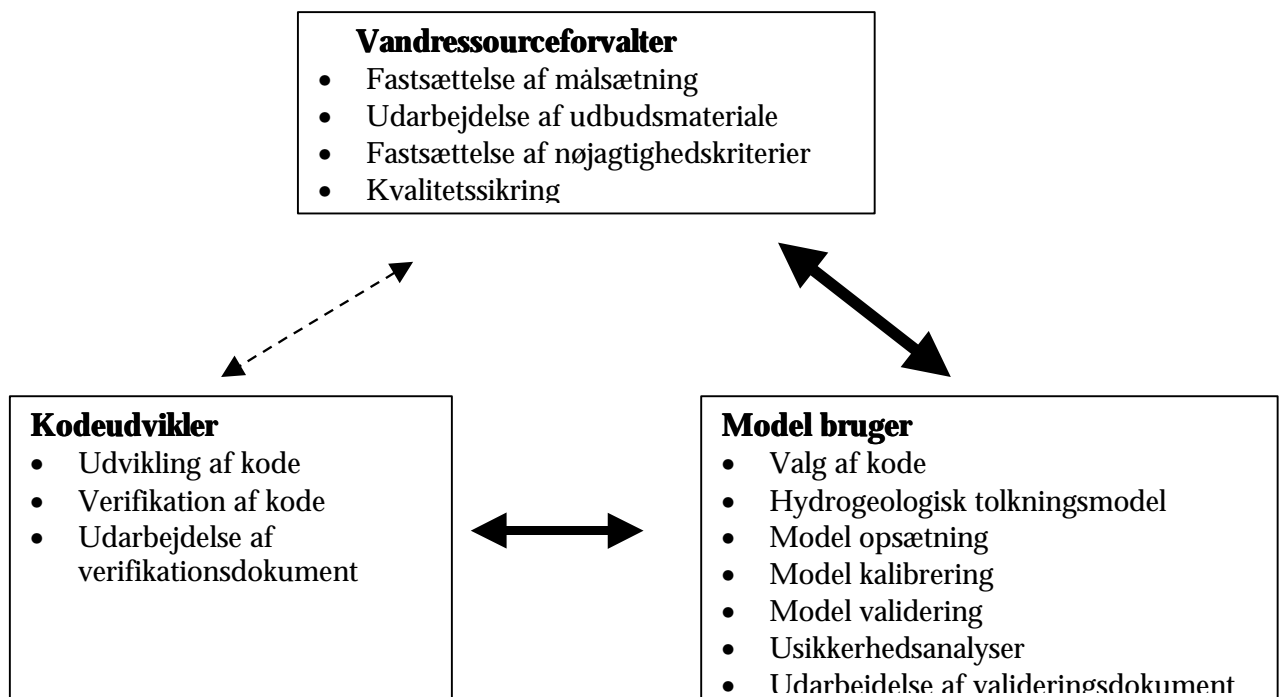


Fig. 2.3 Hovedansvarsområde og samspil mellem de forskellige parter til sikring af en optimal operationel brug af hydrologiske modeller.

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.

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

Det er vigtigt at fremhæve, at de forskellige ansvarsområder, som de tre grupper i Fig. 2.3 har, er principielle, uafhængigt af hvorvidt de aktuelle personer i en konkret sammenhæng tilhører tre forskellige organisationer eller fungerer med forskellige roller i samme organisation.

Ovenstående betragtninger over ansvarsområder hos forskellige parter skal selvfølgelig ses i sammenhæng med den praktiske virkelighed, som i høj grad er styret af et samspil mellem udbud og efterspørgsel samt af betydelig konkurrence både mellem modelbrugere indbyrdes og mellem kodeudviklere indbyrdes. Dvs., hvis forvaltere ikke specificerer krav om en mere grundig og gennemskuelig modelvalidering med givne acceptable nøjagtighedsgrænser, så vil ingen rådgiver tilbyde det i et modelstudie, fordi det økonomisk/kontraktmæssigt er rarer 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.

2.4.2 Situationen i Danmark i dag

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

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

Det faglige niveau blandt udviklere, rådgivere og amter/vandværker med hensyn til modellering generelt er højt i Danmark sammenlignet med andre lande. Men lige netop med hensyn til stringens omkring modelvalidering og dokumentation heraf er vi ikke i front.

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

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, f.eks. på grundvandsdannelsens størrelse i et givent område, på baggrund af samme datagrundlag. Der er således brug for en øget kvalitet såvel i selve modelleringsarbejdet som i samspillet mellem rådgiver og forvalter (Refsgaard og Henriksen, 2000a).

3. FORSLAG TIL DANSKE RETNINGSLINIER FOR STRØMNINGSMODELLER

I forbindelse med zonerings hvor numeriske grundvandsmodeller kan anvendes i forskellige sammenhænge eller trin i processen, er det vigtigt at formålet med modelleringen for et givent projekt / trin i første omgang defineres omhyggeligt, ligesom krav til modelkompleksitet, nøjagtighed mm. bør vurderes.

Der vil normalt gælde forskellige krav til en models troværdighed / nøjagtighed afhængigt af modellens anvendelse. Der skelnes typisk mellem 3 forskellige detaljeringsgrader for grundvandsmodellering:

- screenings model,
- overslagsberegning, og
- akvifer simulering.

Screenings modellen stiller et begrænset krav til afvigelse mellem modellens simuleringer og observationsdata. Eksempler på screeningsmodeller er kvalitative vurderinger af et systems opførelse, vurdering af behov for data og "worst case" simulering.

Overslagsberegninger stiller lidt større krav til overensstemmelse mellem observationsdata og simuleringer, uden det dog er strengt påkrævet at opnå en rigtig god overensstemmelse. Eksempler på modelprojekter af denne type er vurdering af behov for yderligere dataindsamling og indledende faser i projektforløbet (f.eks. en zoneringsopgave).

Akvifer simuleringer stiller de strengeste krav til den overensstemmelse mellem observationsdata og simuleringer, som kan opnås med en given slutmodel. Eksempler på denne type modellering er simulering af trykniveaufordeling, strømningsforhold og koncentrationer i tid og rum, tilvejebringelse af beslutningsgrundlag for indsatsplaner eller projektering af en given indsats. Akvifer simuleringer retter fokus mod modellens troværdighed og nøjagtighed, og benævnes ofte "high fidelity model – Hi Fi" i den engelsksprogede litteratur.

Det er nedenfor i visse retningslinier valgt at opdele modelanvendelsen på tre typer modellering:

- regional vandressourceopgørelse,
- grundvandszonerings, og
- lokal forureningsundersøgelse.

3.1 Generelle retningslinier

På baggrund af de udenlandske og danske erfaringer vedr. opstilling af retningslinier for grundvandsmodellering, som er uddybet og sammenfattet i Appendix B og C, kan der fremhæves følgende retningslinier (1 – 5):

RETNINGSLINIE 1. Det vigtigste dokument i forbindelse med en modelleringsopgave er udbudsbetingelserne (Refsgaard og Henriksen, 2000a). Det gælder både for opgaver, som udføres i egen organisation, og for opgaver, som løses af eksterne rådgivere. Ideelt set bør der f.eks. specificeres, hvilken nøjagtighed slutmodellen skal have. I praksis kan man ikke forudsige alt i detaljer i udbudsbetingelserne, og forvalterens ønsker til f.eks. nøjagtighed vil ofte afhænge af de tilhørende omkostninger. Derfor er det vigtigt at faseinddele opgaven, så der løbende opnås enighed om detaljerne for de(n) næste fase(r). Da en påfølgende fases omfang tildels bestemmes af den foregående fase, kan det være en fordel at lave udbudsmaterialet, således at der kun aftales en præcis pris på en eller flere faser, og at de følgende faser kun prissættes overslagsmæssigt. Dette vil give rådgiveren mulighed for at lave en mere præcis prisfastsættelse samt udbyderen mulighed for eventuelt at ændre det videre projektforsløb i form af ny prisfastsættelse, ændring af betingelser for nye faser eller andet.

RETNINGSLINIE 2. Der er fire tidspunkter i et opgaveforløb, hvor det er særligt påkrævet at indlægge milepæle og lave status (Refsgaard og Henriksen, 2000a). Det drejer sig om: Milepæl 1: Review af hydrogeologisk tolkningsmodel, Milepæl 2: Review af modelopsætning og nøjagtighedskrav, Milepæl 3: Review af kalibrering og validering og Milepæl 4: Review af modelsimuleringer og usikkerhedsanalyser. De to vigtigste milepæle i det samlede forløb vurderes oftest at være hydrogeologisk tolkningsmodel (milepæl 1) samt kalibrering og validering (milepæl 3).

RETNINGSLINIE 3. En god model forudsætter dels en stringent fremgangsmåde, og dels at der etableres en god og konstruktiv dialog mellem vandressourceforvalteren og rådgiveren. En måde at tilvejebringe en sådan dialog kan ske ved, at der gennemføres formelle reviews ved passagen af de 4 milepæle. Derudover er en model i sin natur en forenkling og dermed et kreativt produkt, som forudsætter en iterativ proces og en fortsat konsultation af det virkelige fysiske system, geologens og rekvirentens ønsker og behov. I praksis kan man derfor sjældent afslutte et trin uden også først at have bevæget sig et godt stykke ind i de efterfølgende trin. Det kan med andre ord være nødvendigt at køre samtlige trin i modelprotokollen igennem mere end blot en gang for at opnå et godt slutprodukt.

RETNINGSLINIE 4. Det er vigtigt, at reviews i forbindelse med milepælene formaliseres (Refsgaard og Henriksen, 2000a). Oplæggene fra rådgiveren i forbindelse med de forskellige milepæle kan med fordel formuleres som udkast til de forskellige kapitler i modelrapporten. Som et minimum bør oplæggene fra rådgiveren være skriftlige, og der bør laves beslutningsreferater fra de afholdte møder. Det kan være en god ide at inddrage eksterne personer som reviewere. Det gælder især ved vurderingen af kvaliteten af modelleringsarbejdet. Der skelnes 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, f.eks. nogle år senere.

Se tabel 3.1.

RETNINGSLINIE 5. Der anbefales en mere standardiseret rapportering af modelarbejder med en bedre dokumentation af de vigtigste trin i forbindelse med et modelprojekt (Henriksen, 2000a) . 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 er imidlertid påkrævet at ændre denne praksis i forbindelse med den modellering, der skal forekomme i de kommende år omkring detailkortlægning og zonerig. 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.

	Screening	Overslagsberegninger	Akvifer simulering ("Hi fi")	
			Planlægningsstudie/ lavrisiko	Grundlag for ekspropriation/ højrisiko
Milepæl 1 Hydrogeologisk tolkningsmodel	Model appraisal af samlet opgave	Model appraisal	Peer review	Peer review
Milepæl 2 Modelopsætning og nøjagtighedskrav		Intet	Peer review	Peer review
Milepæl 3 Kalibrering og validering		Peer review	Peer review	Model audit
Milepæl 4 Modelsimuleringer og usikkerhedsanalyse		Intet	Peer review	Model audit

Tabel 3.1 Behov for forskellige typer af review i forskellige situationer (Refsgaard og Henriksen, 2000a)

3.2 Retningslinier for opstilling af hydrogeologisk tolkningsmodel (milepæl 1)

En hydrogeologisk tolkningsmodel indeholder brugerens opfattelse af de vigtigste hydrologiske processer og geologiske forhold. Endvidere indeholder den de simplifikationer, som forventes at være acceptable i en numeriske model, når den skal kunne opfylde de målsætninger, brugeren stiller til modelleringsværktøjet i den konkrete opgave.

RETNINGSLINIE 6. Vigtige elementer i udbudsbetingelser er (Refsgaard og Henriksen, 2000a):

- *Beskrivelse af opgavens målsætning*
- *Beskrivelse af ønsker til nøjagtighed*
- *Beskrivelse af ønsker til kalibrerings- og valideringsgrundlag*
- *Beskrivelse af ønsker til usikkerhedsvurdering*
- *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 standardiseret rapportering.*

RETNINGSLINIE 7. I forbindelse med zoneringsen, 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 (Henriksen, 2000b). Det vil sige:

- *Præcisér de specifikke formål med modelsimuleringerne, herunder det nødvendige analyseniveau (modelkompleksitet jf. tabel 3.1 screening, overslagsberegning og akvifer simulering)*
- *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?*
- *Hvor følsomt er det for projektet/projekttrinnet, at modelsimuleringerne eventuelt giver ukorrekte eller usikre resultater?*

RETNINGSLINIE 8. Opstillingen af den geologiske model med udgangspunkt i boringsdata er i al simpelhed et spørgsmål om at korrelere lag af samme alder fra boring til boring (Gravesen, 2000). Konstruktion af tredimensionelle geologiske modeller indeholder et væsentlig element af tolkning, som må baseres på kendskab og erfaring fra kendte modeller. Når den geologiske model er etableret, kan denne anvendes videre til udarbejdelse af en hydrogeologisk tolkningsmodel. De geologiske modeller vises ofte som tværprofiler, der sammenstilles i fencediagrammer eller blokdiagrammer eller som flader eller grafik på kortflader.

RETNINGSLINIE 9. Der findes en række forskellige metoder til tolkning af 3D geologiske modeller:

- *Profiltolkning* (der opstilles horisontale og vertikale profiler gennem modelområdet og de enkelte laggrænser interpoleres efterfølgende ud fra tolkede boringer og evt. støttepunkter),
 - *Slice-tolkning* (der tolkes et antal dominerende "bjergarter/jordtyper" i udvalgte "kasser" og intervaller f.eks. 1000x1000x10 m eller mindre, jf. DK-model Jylland)
 - *Punkttolkning* (lagfølge tolkes i de enkelte boringer og interpoleres)
 - *Gridtolkning* (lagfølge tolkes i et beregningsgrid jf. DK-model Fyn og Sjælland)
- Profiltolkning har været den hyppigst anvendte metodik gennem en årrække, og anbefales i forbindelse med detailkortlægning og zonerings. Opdatering af den geologiske model med nye data (f.eks. nye boringer, geofysiske data mv.) i forbindelse med profiltolkning, kræver brug af et GIS-baseret geologisk modelværktøj, som kan holde styr på datagrundlaget og tolkede profiler og give mulighed for på et senere tidspunkt at tilføje nye data (Geoeditor er et eksempel på et sådant værktøj til 3D geologisk modellering). Ved arbejdet på større skala (f.eks. national vandressource model-/regional skala) har slice-tolkning en række fortrin i forhold til profiltolkning. En ulempe ved slice-tolkning er, at kun den dominerende jordtype/bjergart repræsenteres i hvert grid, men fordelene ved metoden er til gengæld, at de geologiske lag ikke behøver at være gennemgående i hele modelområdet (jf. at metoden kan betegnes som "studentbrødsgeologi" i stedet for "lagkagegeologi"). Slice-tolkning kan være en alternativ metode i forbindelse med detailkortlægning og zonerings, der mangler dog i dag konkrete erfaringer ud fra sammenligninger af fordele og ulemper ved de to metoder.*

RETNINGSLINIE 10. På baggrund af formålet med den konkrete opgave og områdets hydrologiske og geologiske karakteristika foretages 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 (Refsgaard og Henriksen, 2000b). Det kan derfor anbefales at opstille den geologiske model og den hydrogeologiske tolkningsmodel for et område, som er 2-4 gange større end det område, den numeriske model arbejder indenfor. Data bør samles og processeres i et GIS-system, således at det sikres at modelopstillingen kan reproducere og opdateres på et senere tidspunkt.

RETNINGSLINIE 11. 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. Endvidere skal der tages stilling til hvilken grad af kompleksitet, det er nødvendigt at medtage i modelbeskrivelsen (se tabel 3.2). Med baggrund i den geologiske model og formålet med den givne opgave besluttet detaljeringsgraden og strukturen af de geologiske informationer, der skal indgå i modellen, dvs. der foretages en fastlæggelse af de hydrostratigrafiske enheder. Ved valg af tidsperiode skal der tages hensyn til, at der som regel vil være behov for både en periode til modelkalibrering og en uafhængig periode til modelvalidering. Såfremt oppumpningsforholdene er nogenlunde konstante, vil der typisk være behov for to perioder af 5-8 års længde. Ved parametrisering fastsættes de rumlige mønstre af parameterverdierne således, at en given parameter kun afspejler de signifikante og systematiske variationer, som kan beskrives ved de tilgængelige felldata. Det kan f.eks. 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. En komplicerende faktor ved fastsættelse af parameterværdier direkte ud fra feltdata udgøres af skalaproblemet. Som afslutning på etableringen af den hydrogeologiske tolkningsmodel er det vigtigt at vurdere, hvorvidt den er tilstrækkelig til den foreliggende opgave og usikkerheder knyttet til tolkningen, der ligger til grund for denne (Refsgaard og Henriksen, 2000b).

RETNINGSLINIE 12. Det anbefales at der opstilles flere forskellige "lige sandsynlige" hydrogeologiske tolkningsmodeller med forskellige antagelser om grundvandsdannelse, indre og ydre randbetingelser, processer, hydrostratigrafi og "zoner" af parameterværdier. Disse forskellige tolkningsmodeller bæres videre gennem de efterfølgende trin i modelprotokollen, indtil de "forkerte" hydrogeologiske tolkningsmodeller, på baggrund af observationer i kalibrerings- og valideringsfasen, evt. kan elimineres. Herved er der mulighed for at foretage vurderinger af betydningen af usikkerheden på modelstruktur og hydrogeologisk tolkning i forbindelse med simuleringerne. Inverse metoder kan med fordel anvendes ved kalibrering af de alternative tolkningsmodeller. Modelløren kan således benytte sine kræfter på opstilling af alternative tolkningsmodeller og analyser af resultater i stedet for på kalibrering. Resultaterne fra den inverse modellering kan anvendes til at kvantificere, hvilke modeller der må formodes at give den mest korrekte repræsentation af virkeligheden, baseret på de benyttede data (Poeter og Hill, 1997).

RETNINGSLINIE 13. Ved passagen af milepæl 1: Review af hydrogeologisk tolkningsmodel, skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende (Refsgaard og Henriksen, 2000a):

- 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 feltdata
- Foreløbige angivelser af nøjagtighedskrav i modelleringen
- Risiko for at modelprojektet evt. ikke kan gennemføres som beskrevet (kritiske antagelser)

3.3 Retningslinier for modelopstilling og nøjagtighedskriterier (milepæl 2)

Modelopstilling indebærer valg af modelkode, fastlæggelse af randbetingelser, diskretisering, parameterfastsættelse/distribuering, processering af tidsseriedata, vurdering af betydning af initialværdier og fastlæggelse af nøjagtighedskriterier. Det er vigtigt at vælge en kode, der dels indeholder den ønskede beskrivelse af processerne, dels faciliterer en effektiv indlæggelse af data. Randbetingelser beskriver, hvorledes den 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. Diskretisering består hovedsagelig i at opdele den fysiske model rumligt i et stort antal beregningsceller, derudover er der ved ikke stationære beregninger behov for såvel vurdering af passende initialværdier som tidlig diskretisering.

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

RETNINGSLINIE 14. Ved valget af kode er der mange forskellige faktorer, der spiller ind. I prioriteret rækkefølge kan følgende faktorer inddrages (Brun, 2000a, Henriksen, 2000c):

- *Procesbeskrivelsen, herunder mulige randbetingelser. Randbetingelser er sammenhængende med procesbeskrivelsen, idet nogle processer, eksempelvis udveksling med vandløb og oppumpning, indbygges som randbetingelser (Jensen, 2000a).*
- *Mulighed for automatisk at indbygge hydrogeologiske egenskaber ud fra en rumlig opfattelse af hydrogeologien er et meget væsentligt element i præprocesseringen.*
- *Mulighed for invers modellering samt andre former 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.*

RETNINGSLINIE 15. Det anbefales at udarbejde modellen idet der startes med så simpel en modelopstilling og parametrisering som muligt, dvs. med færrest mulige "zoner" (grundvandsdannelse, parameterværdier, udveksling med vandløbssystem osv.). Gradvist indbygges herefter større og større detaljering af modellen i takt med modelopstilling og kalibrering, således at alle væsentlige processer og elementer i modellen gradvist detaljeres i samme takt. Det anbefales først at opstille og kalibrere en stationær model. Herved kan modelstruktur og randbetingelser gradvist udvikles og der kan fås feedback til justeringer på et tidligt tidspunkt i processen. Senere udbygges modellen til dynamisk beskrivelse til brug for kalibrering, validering og simuleringer.

RETNINGSLINIE 16. Det skal på alle ydre rande af den numeriske model være beskrevet, hvorledes disse reagerer i forhold til omverdenen (Brun, 2000b, Jensen, 2000a). Konceptuelt er der forskellige metoder til at beskrive vandudvekslingen mellem vandløb og grundvand, som bør nøje overvejes i forbindelse med modelopstilling. Som nævnt tidligere kan forskellige antagelser afprøves ved at der arbejdes med et antal alternative konceptuelle modeller / modeldesigns, som så nærmere evalueres og evt. elimineres i de senere faser på baggrund af sammenligninger med observationer fra det konkrete område.

RETNINGSLINIE 17. Følgende forhold bør inddrages ved valget af numerisk net og dermed den stedlige diskretisering (Brun, 2000c, Jensen, 2000a):

- *variationer i vandspejlet*
- *magasin-egenskaber*
- *retning af strømning*
- *geologisk lagdeling*
- *stedslig variation i infiltration, oppumpning, udveksling med vandløb*
- *antal beregningsceller*
- *behov for finere diskretisering i delområder*

En simpel undersøgelse af diskretiseringsgraden, kan gennemføres ved at sammenligne resultaterne fra to simuleringer udført med forskellig diskretisering.

RETNINGSLINIE 18. Vertikal diskretisering af en strømningsmodel vil ofte være et "kompromis" mellem en række modsatrettede ønsker og behov. Der er i princippet to forskellige hovedtyper man kan vælge mellem:

- *A) "Vektor-metoden", at lade beregningslag følge de geologiske lag, selvom disse har stærkt varierende kote og evt. klinger ud/bliver til tynde lag i dele af modelområdet*
- *B) "Pixel-metoden", at lade beregningslag udgøres af et relativt regulært numerisk net, hvor f.eks. det øverste beregningslag er placeret 2 m under grundvandspejlet, og det følgende lag består af lige tykke og nogenlunde regulære vandrette lag.*

Vektor-metoden (type A) giver mulighed for at lade beregningslag følge de hydrostratigrafiske enheder. Et bestemt beregningslag svarer dermed til den samme enhed f.eks. "kalken". Det, at lagene i visse områder blive tynde, skråtstillede mm. kan dog medføre alvorlige numeriske problemer, som kan give vandbalancefejl, problemer med partikelbane- og stoftransportberegninger, hvilket ofte er særlig kritisk ved stationære kørsler, hvor man kan risikere at modellen ikke konvergerer,

eller ikke er tilstrækkelig robust til f.eks. invers modellering. Man kan ikke her få pålidelige modelresultater. Pixel-metoden (type B) med et mere regulært beregningsgrid (vertikalt) er i modsætning hertil meget mere stabil ved stationære kørsler, partikelbane- og stoftransportkørsler, og også i forbindelse med udveksling af randbetingelser mellem regional model og submodel. Ulempen ved Pixel-metoden er, at tynde lag "forsvinder" eller "udviskes". Det er ikke noget problem i forbindelse med vandbalance- og vandressourcevurderinger, men metoden bør ikke anvendes uden omtanke i forbindelse med stoftransportmodellering, hvis der forekommer f.eks. tynde lerlag, som bør repræsenteres "eksplicit" i modelopsætningen. Visse modelkoder giver mulighed for arbejde med "hydrostratigrafiske enheder", dvs. at man kan definere de "kasser" fra forskellige lag, der repræsenterer et givent grundvandsmagasin. Se også RETNINGSLINIE 9.

	Regional vandressourceopgørelse		Grundvandszoner		Lokal forureningsundersøgelse	
	Simple, indledende undersøgelser	Detailundersøgelser (vandindvinding, vandløbspåvirkninger)	Udpegning af sårbare områder	Indsatsplaner	Overlagsberegning	Detailberegning
Hvordan skal vandløb og søer repræsenteres ?	Medtages som stationære randbetingelser. Desuden skal vandføringsdata benyttes til check af vandbalancen	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 rodzone / umættet zone medtages ?	JA, på en eller anden måde til estimering af aktuel fordampning fra rodzonen	JA, rodzonen	NEJ	JA, til skøn af forureningstransport og adsorption/nedbrydning (nitrat og pesticider)	NEJ	Sjældent
Hvor kompleks skal den umættede zone beskrives ?	Gravitationsstrømning eller boksmode	Richards' ligning nødvendig for områder med højt grundvandsspejl (f.eks. ånære områder). Ellers er simple metoder ofte tilstrækkelige	-	Richards' ligning plus absorption/nedbrydning	-	I tilfælde hvor umættet zone beskrivelse er nødvendig vil der ofte kræves Richards' ligning plus absorption-nedbrydning
Præferentiel 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 3Dbeskrivelse med fokus på oplands- eller regional skala	Flerlags- eller fuld 3D beskrivelse med fokus på oplandsskala	Fuld 3D beskrivelse med fokus på lokal skala	2D eller flerlags beskrivelse ofte tilstrækkelig	Fuld 3D beskrivelse med fokus på lokal skala
Præferentiel 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 saltvandsproblemer	NEJ	JA, i tilfælde hvor der er potentielle densitetsproblemer (saltvand/forurening)

Tabel 3.2 Typiske valg af kompleksitetsniveau for den hydrogeologiske tolkningsmodel

RETNINGSLINIE 19. Anvendelsen af en numerisk model forudsætter, at parametrene, som indgår i de diskretiserede ligninger, f.eks. strømningssligningen kvantificeres (Sonnenborg, 2000a). I tilfældet med tredimensional ikke-stationær grundvandsstrømning skal der for hvert numerisk element fastsættes værdier for de hydrauliske egenskaber udtrykt ved parametrene K_x , K_y , K_z , og S_s . Antallet af numeriske elementer vil stort set altid overstige antallet af målinger af de hydrauliske parametre, der er til rådighed i et givet 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 ofte resultere i for store afvigelser mellem observerede og simulerede tilstandsvariable. Det skyldes for det første, at geologien sjældent varierer jævnt mellem målepunkterne, og der er derfor stor sandsynlighed for, at heterogeniteter overses med denne metode. Og for det andet resulterer skalaeffekter i, at det er vanskeligt at importere feltmålinger af hydrauliske egenskaber direkte til den numeriske model. Det bedste resultat opnås normalt, hvis modellens parametre estimeres vha. den anden metode, dvs. ud fra observationer af eksempelvis hydraulisk trykniveau.

RETNINGSLINIE 20. Ved ikke-stationære beregninger har startværdierne stor indflydelse, specielt på vandbalancen (Brun 2000d). 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. Længden af denne periode – opvarmningsperioden - 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, se tabel 3.3. Startværdierne indflydelse kan kun kvantificeres ved beregninger udført for den specifikke model med varierende startværdier. Generelt kan man optegne en teoretisk kurve for betydningen af randbetingelser i forhold til startværdier. I den første periode af simuleringen vil startværdierne være mest afgørende. Efterhånden som beregningen skrider frem, vil randbetingelserne langsomt overtage for til sidst at være helt afgørende. Denne situation svarer til den stationære beregning, hvor startværdierne ikke har indflydelse på resultatet.

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

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

Tabel 3.3 Vejledende værdier for længde af opvarmningsperiode (Brun, 2000d).

RETNINGSLINIE 21. 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 (Refsgaard, 2000a). Bestemmelsen af arealfordelingen af nedbøren er 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. 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

RETNINGSLINIE 22. Den potentielle fordampning bestemmes derfor ofte indirekte ved anvendelse af formler, hvori indgår forskellige målelige klimatiske variable foreksempel indstråling, temperatur og vindhastighed (Refsgaard, 2000a). Den mest kendte formel er formentlig Penman, som i modificeret form, Mikkelsen og Olesen (1991), danner grundlag for DMI's beregninger af den potentielle fordampning i klimagridet, Scharling (1999b). Dansk Jordbrugsforskning (DJF) er den normale leverandør af data vedrørende potentiel fordampning. Herfra kan data rekvireres på forskellig tids- og rumlig skala; døgnværdier på forskellige regioner i Danmark er den groveste 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.

RETNINGSLINIE 23. Beregningen af den aktuelle fordampning er ofte baseret på at bestemme reduktionen af den potentielle fordampning. Der skal anvendes flere variable til beregning af den aktuelle fordampning. Flere af disse såsom roddybde, potentiel fordampning, bladarealindeks varierer som funktion af tiden. Det er 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 (Refsgaard, 2000a).

RETNINGSLINIE 24. Realistiske vandindvindingsdata er normalt de data, der er størst problemer med at fremskaffe, specielt hvor det er ønskeligt at have informationen på enkeltboringer og med en god tidslig opløsning (Refsgaard, 2000a). 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.

RETNINGSLINIE 25. Kalibreringen og pålideligheden af grundvandsmodeller afhænger meget af tilgængeligheden af gode pejledata (Refsgaard, 2000a). 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. Fejkilderne i tidsserier af pejledata ligger primært i, at pejlingen er foretaget for tæt på kildepladser med skiftende

oppumpning fra boringerne. Dette kan influere på pejlingen og kan give anledning til misfortolkning af variationer i potentialet.

RETNINGSLINIE 26. Målinger af vandføringer i vandløb er traditionelt blevet foretaget og indsamlet af Hedeselskabets Hydrometriske Afdeling (Refsgaard, 2000a). I dag findes disse data i stor udstrækning hos amterne. Desuden har DMU en komplet database med kontinuerte vandstands- og afstrømningsmålinger.

RETNINGSLINIE 27. Ved passage af milepæl 2: Review af modelopsætning og nøjagtighedskrav efter at modellen er sat op og der er gennemført en enkelt modelkørsel, skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende (Refsgaard og Henriksen, 2000a):

- *Godkendelse af model opsætningen*
- *Godkendelse af nøjagtighedskrav i modelleringen*
- *Forslag til kalibreringsprocedure*
- *Forslag til valideringsprocedure*
- *Forslag til usikkerhedsanalyser*

3.4 Retningslinier vedr. milepæl 3 – Kalibrering og validering

I forbindelse med kalibrering justeres parameterverdierne med det formål at opnå en god overensstemmelse mellem målte og simulerede tilstandsvariable. Denne proces, hvor der estimeres parametre og randbetingelser, som gør strømningsmodellen i stand til at reproducere f.eks. trykniveau- og vandføringsmålinger med en på forhånd given præcision, benævnes modelkalibrering eller blot kalibrering. I kalibreringsprocessen tilpasses parametrene med det formål at minimere residualerne (afvigelsen mellem observeret værdi og modelresultat). Herved opnås parameterestimer, som gør modellen i stand til at reproducere systemets opførsel i kalibreringsperioden (tidsperioden hvorfra data, der anvendes til kalibrering, stammer fra), med forhåbentlig acceptabel præcision. I den efterfølgende valideringsfase vurderes det, om modellen også er i stand til at prediktere det fysiske systems opførsel i valideringsperioden (Sonnenborg, 2000a).

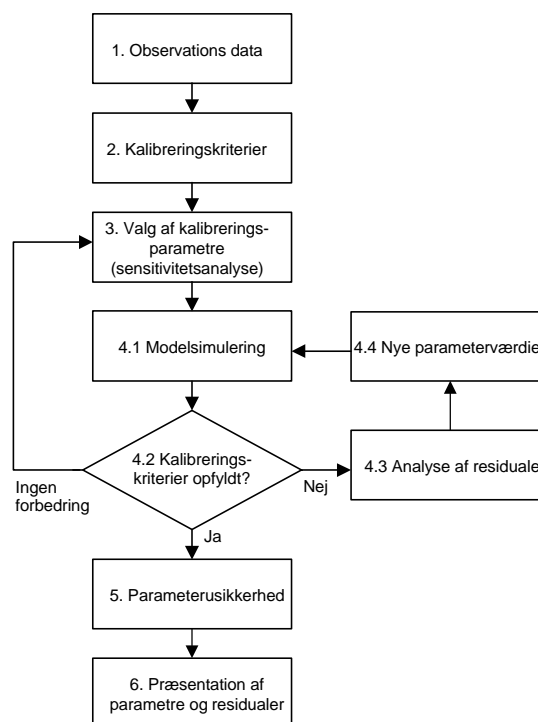
Kalibrering er en af de mest tidskrævende faser i modeludviklingen. Samtidig er det et af de mest kritiske trin i udviklingen af en pålidelig model. Det er derfor af afgørende betydning, at kalibreringsprocessen struktureres hensigtsmæssigt. De første tre trin i kalibreringsprocessen er valg af kalibreringsdata, kalibreringskriterier og kalibreringsparametre. Dernæst følger estimeringen af parametre, hvor der er taget udgangspunkt i anvendelse af manuel kalibrering, men hvor også automatisk kalibrering f.eks. PEST (Doherty, 1994) eller UCODE (Poeter and Hill, 1998) kan anvendes. Endelig skal usikkerheden på kalibreringsparametrene vurderes, og resultaterne af kalibreringsprocessen præsenteres (Sonnenborg, 2000a).

Et vigtigt element i modelvalideringen er fastsættelsen af relevante tests. 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. Valideringen skal således dokumentere, at modellen kan producere beregningsresultater, som kan opfylde de givne nøjagtighedskrav.

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 (Sonnenborg, 2000b).

RETNINGSLINIE 28. Kalibreringen af en grundvandsmodel kan med fordel gennemføres jf. en såkaldt "kalibreringsprotokol" (se figur 3.1). Observationsdata er en basal forudsætning for at kunne gennemføre en kalibrering. Det er vigtigt at vurdere usikkerheden på de anvendte observationer. Det næste skridt i kalibreringsprocessen består i at opstille både kvantitative og kvalitative kriterier for, hvor præcist modellen skal reproducere de observerede værdier. Derefter skal det analyseres, hvilke modelparametre, der skal udvælges som kalibreringsparametre. Til dette formål vil både en analyse af det fysiske system samt en følsomhedsanalyse af potentielle kalibreringsparametre med fordel kunne udføres. Efter de tre indledende faser er gennemført, kan selve estimeringen foretages. Denne iterative proces forløber ved successivt at ændre værdierne af kalibreringsparametrene. Ændringerne foretages på basis af en analyse af residualerne, enten ud fra en fysisk indsigt i det modellerede

system eller ved gennemførelse af en detaljeret følsomhedsanalyse. Estimeringsprocessen kan afsluttes med en analyse af usikkerheden på de estimerede kalibreringsparametre. Endelig bør resultatet af kalibreringen rapporteres, hvilket inkluderer præsentation og vurdering af optimerede parametre og simuleringresultater (Sonnenborg, 2000a).



Figur 3.1 Kalibreringsprotokol, med trin i kalibreringsprocessen (Sonnenborg, 2000a).

RETNINGSLINIE 29. I arbejdet med strømningsmodeller vil det primært være målinger af hydraulisk trykniveau og vandløbsvandføring, der kan inkluderes i kalibreringsprocessen (Sonnenborg, 2000a). Det foreliggende datasæt bør analyseres for systematiske fejl. Trykniveaumålinger kan være påvirket af effekter, som ikke er inkluderet i den opstillede model såsom pumpning på borer, som ikke er repræsenteret i modellen m.m. Det anbefales derfor, at de tilgængelige data evalueres f.eks. vha. konturplot eller anden visuel teknik til at illustrere det generelle trykniveaubillede i området. Når der anvendes en stationær grundvandsmodel, er udvælgelse af repræsentative data langt fra trivial. 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 grundvandsmagasiner, og det skal derfor vælges, hvilken situation der ønskes en model for. Vandføringsdata indgår ved kalibrering af modelopsætninger, og kan anvendes som et indirekte mål for grundvandets udveksling med vandløb, her benævnt "baseflow", ved at inddrage værdier af vandløbenes sommervandføringer, hvor den mindste vandføring i vandløbet optræder.

RETNINGSLINIE 30. Hvis det skal være muligt at estimere rumligt distribuerede parametre, er det vigtigt, at der er observationsdata til rådighed i hele det modellerede område (Sonnenborg, 2000a). 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 er derfor hensigtsmæssigt at eliminere observationer i områder, hvor densiteten af data er stor. Herved undgås, at visse områder tillægges meget større vægt end andre, når kalibreringen

gennemføres, idet modelløren vil være tilbøjelig til at vurdere kalibreringsresultatet ud fra nogle kvantitative numeriske kriterier (se Appendix A). Hvad enten der simuleres stationært eller ikke-stationært kan det anbefales, at både trykniveau og vandføring inddrages i kalibreringen. Jo flere typer data der anvendes, des større chance er der for at undgå problemer med manglende identificerbarhed og entydighed. Desuden kan indragelsen af flere datatyper resultere i en reduktion af usikkerheden på de estimerede parametre (Christensen et al. 1998).

RETNINGSLINIE 31. Trykniveauobservationer kan være behæftet med en række fejl bl.a. målefejl, skalaeffekter, interpolationsfejl, geologisk heterogenitet og tidsskalaeffekter (Sonnenborg, 2000a). I tabel 3.4 er vist et eksempel på fejlanalyse for Esbjerg modellen og DK-model Fyn. Samlet vil målefejlene typisk resultere i en standardafvigelse på trykniveauobservationsværdien på 5 – 30 cm. 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. Observationsboringens horisontale placering vil 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 være proportional med den anvendte horisontale diskretisering og gradienten på trykniveauet i området. 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. Det kræver derfor et detaljeret kendskab til den rumlige variabilitet af den hydrauliske ledningsevne, som sjældent er tilgængelig i praksis, at kvantificere denne type fejl. Imidlertid kan det være muligt at give et skøn over den hydrauliske ledningsevnes geostatistiske egenskaber ved at inddrage erfaringsværdier fra sammenlignelige områder. Alternativt kan fejlen vurderes, hvis tryknivaudata fra tætstående borer er til rådighed. Tidsskalaeffekter kan være en fejkilde, 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.

Tabel 3.4 Angivelse af standardafvigelse, s_{obs} (i m) på observationer af hydraulisk trykniveau. Δx betegner den horisontale diskretisering, J er den hydrauliske gradient, og d er dybden under terræn (Sonnenborg, 2000a; Christensen, 1997; Christensen et al. 1998).

	Pejlefejl		Skalafejl		Ikke-stationaritet	Andre effekter ³⁾	Samlet usikkerhed
	Målefejl	Kote	Interpol.	Heterogen.			
Generelt	0.05–0.3	0 – 2	0.5 $\Delta x J$	$\hat{a}_1 s_{\ln K} J^{2)}$	$\Delta h_t/2$ ³⁾	0 – 1	$\sqrt{\Sigma s^2}$
Esbjerg	0.1	1.5	0.5	1.0	0.5	0.25	2.0
Fyn	0.1	1.5	1.5	2.1	0.5	0.25	3.0

- 1) $s_{\ln K}$ er standardafvigelsen på log K. \hat{a}_1 er korrelationslængden for log K (hvis korrelationslængden er større end den anvendte diskretisering, Δx , er $\hat{a}_1 = \Delta x$).
- 2) Δh_t angiver forskellen mellem maksimum og minimum trykniveau i tidsserien.
- 3) Inkluderer effekter som vertikal skalafejl og variationer i topografi.

RETNINGSLINIE 32. Det er hensigtsmæssigt at opstille kriterier for, hvor præcist modellen skal kunne reproducere kalibreringsdata (Sonnenborg, 2000a). Herved sikres det, at modellen opnår en kvalitet, som er i overensstemmelse med formålet med modelarbejdet. Samtidig sikrer klare kalibreringskriterier, at modelløren ved, hvornår modellen kan betragtes som færdigkalibreret. Både kvantitative og kvalitative kriterier kan med fordel specificeres. Det fører til følgende typer kriterier:

$$\frac{ME}{\Delta h_{max}} \leq \mathbf{a} \quad \text{kriterium 1}$$

Vurdering af middelfejl (ME), hvor 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 trykniveauforskel i modelområdet skal være mindre end \mathbf{a} .

Hvis der ikke er foretaget en kvantificering af observationsusikkerheden, vil følgende kriterium kunne anvendes til at vurdere, hvor godt observationsdata i gennemsnit simuleres (vurdering af spredningen på residualerne i forhold til trykniveauvariationen i området):

$$\frac{RMS}{\Delta h_{max}} \leq \mathbf{b} \quad \text{kriterium 2}$$

Hvis usikkerheden på observationsdata er kvantificeret, kan afvigelsen mellem observeret og simuleret værdi sammenlignes med observationsusikkerheden. Hvis der kun indgår én datatype i kriteriet, og alle data er behæftet med samme usikkerhed, kan følgende anvendes:

$$\frac{RMS}{s_{tot}} \leq \Omega \quad \text{kriterium 3}$$

hvor s_{tot} er standardafvigelsen på observationsdata.

Hvis der er variabel usikkerhed på de inkluderede observationsdata, kan følgende kriterium anvendes:

$$SE \leq \Omega \quad \text{kriterium 4}$$

Hvor stringente krav, der skal opstilles til en given model, afhænger af formålet med undersøgelsen.

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 fornuftigt både i tid og sted*
- 3. Områdets hydrogeologiske karakteristika skal reproduceres af modellen. Det må kræves, at modellen er i stand til at simulere eksempelvis strømningsretning eller beliggenheden af grundvandsskel korrekt.*

Afhængigt af, om usikkerheden på observationsdata er bestemt, kan både kriterium 1 samt et af de tre kriterier 2, 3 og 4 specificeres.

RETNINGSLINIE 33. Følgende forhold skal tages i betragtning, når kalibreringsparametrene udvælges (Sonnenborg, 2000a):

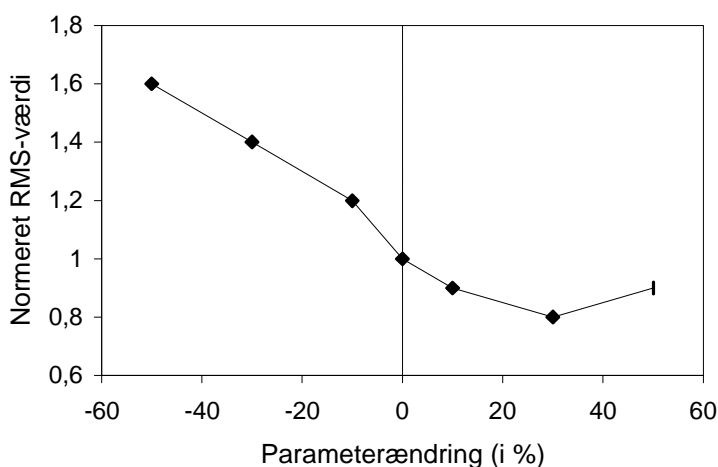
- 1. De skal være identificerbare*
- 2. De skal være relativt dårligt kendt*

3. De simulerede tilstandsvariable skal være tilstrækkeligt sensitive overfor ændringer i parameteren
4. Antallet af parametre skal minimeres.

Til den endelige udvælgelse af kalibreringsparametre er en simpel følsomhedsanalyse 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 oprindelige værdi, og den resulterende påvirkning af de simulerede tilstandsvariable registreres. På baggrund af følsomhedsanalysen 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. Inverse metoder kan med fordel anvendes til beregning af følsomhed. En gevinst ved at anvende inverse metoder til beregning af følsomhed er, at korrelationen mellem parametrene samtidigt beregnes (Poeter and Hill, 1997).

RETNINGSLINIE 34. Kalibreringsparametrene kan bestemmes enten ved manuel kalibrering eller automatisk kalibrering ved inverteret 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, hvorved optimale parameterværdier kan estimeres uden modellørens indblanding. Begge teknikker kan have problemer med at estimere optimale parametre, hvilket ofte skyldes manglende entydighed. For inverse metoder er problemet ikke entydigt, hvis forskellige parametersæt kan fremkomme fra samme observationsdatasæt. Hvis antallet af parametre overstiger antallet af observationer, vil problemet ligeledes være ikke-entydigt.

Estimeringsprocessen kan gøres betydeligt mere gennemskuelig, hvis der gennemføres en detaljeret følsomhedsanalyse, 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 figur 3.2 ses, at der opnås en bedre beskrivelse af observationsdata, hvis den aktuelle kalibreringsparameter forøges med ca. 30%.



Figur 3.2 Resultat af detaljeret følsomhedsanalyse udført på en parameter vha. 6 modelsimuleringer. RMS normeret med RMS-værdien opnået for det foregående iterationstrin er anvendt som kriterium for parameterændringen (Sonnenborg, 2000a).

RETNINGSLINIE 35. Inverse metoder har været kendt i næsten lige så lang tid, som de numeriske modeller har været anvendt, men benyttes ikke tilnærmelsesvis i samme udstrækning (Sonnenborg, 2000a). 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 problemer med identificerbarhed og entydighed beskrevet ovenfor. En af fordelene ved invers modellering er, at den vil afsløre de nævnte problemer, som kan skyldes problemer med tolkningsmodellen, modelopsætningen (parameteriseringen) eller kalibreringens trin 1-3 (fig. 3.1) og dermed gøre modelleringsresultaterne mere troværdige (Carrera, 1990). Forskellen på manuel og automatisk kalibrering ligger hovedsageligt i kalibreringsprotokollens trin 4.1 – 4.4. Det kan anbefales at kombinere metoderne, så der indledes med grovkalibrering ved anvendelse af manuel kalibrering, og afsluttes med invers kalibrering til finkalibrering (Sonnenborg et al., 2000). Under grovkalibreringen er det dog en fordel at benytte den inverse model til at foretage en følsomhedsanalyse på parametrene.

RETNINGSLINIE 36. Modtageren af modelresultaterne vil sjældent være interesseret i en alt for detaljeret beskrivelse af udviklingen (i form af en kalibreringsjournal) af de enkelte parametres værdi gennem den iterative optimering af modellen, hvor der typisk foretages mellem 50 og flere hundrede simuleringer (Sonnenborg, 2000a). Det vil imidlertid være interessant at blive præsenteret for eventuelle ændringer i den opstillede model for kalibreringsprocessen, dvs. i de tilfælde, hvor estimeringsprocessen 4.1 – 4.4 i figur 3.1 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 i kalibreringsforløbet, er det hensigtsmæssigt at præsentere de bedste værdier af de benyttede normer for hver model (jf. Appendix A). Herved kan modtageren få et indblik i, hvilke ændringer der har været afprøvet.

RETNINGSLINIE 37. De optimerede parameter værdier skal præsenteres enten i tabelform eller som en grafisk illustration (f.eks. plot af residualtrykniveauafvigelse mod simuleret trykniveau, scatterplot og residualplot). Samtidig skal der foretages en evaluering af de estimerede parametres fysiske relevans. I en grafisk illustration kan parameterintervallerne estimeret under analysen af tilgængelige feltmålinger sammenholdes med de optimerede parametre, hvilket gør det muligt at foretage en vurdering af, om de estimerede parametre holder sig indenfor de fysiske 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 følsomhedsanalyse. Herved opnås et udtryk for modellens følsomhed overfor de analyserede parametre, og usikkerheden på parameter værdien kan derefter vurderes, idet den generelt kan antages at være omvendt proportional med modellens følsomhed. Det er ikke muligt at kvantificere parameter usikkerheden direkte vha. denne metode, men det kan vurderes, hvordan parametrene indbyrdes er rangeret mht. model følsomhed. Hvis der er anvendt en invers model baseret på en gradientløsning, som f.eks. PEST (Doherty, 1994) eller UCODE (Poeter and Hill, 1998), er det muligt at kvantificere parameter usikkerheden direkte.

RETNINGSLINIE 38. 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. Modelvalidering er, en dokumentation for, at en model kan producere beregningsresultater, som kan opfylde de givne nøjagtighedskrav. Det er derfor nødvendigt at specificere sådanne nøjagtighedskrav, før kalibreringen og valideringstestene 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.

RETNINGSLINIE 39. Som beskrevet er det meget afgørende for en models prediktionsevne, at antallet af parameterværdier, som fastsættes "frit" i kalibreringen, er så lavt som muligt, så modellen ikke "overparameteriseres". Problemstillingen er illustreret i Fig. 3.3 (Refsgaard, 2000b), der er fremkommet som resultat af en split-sample test, hvor der i kalibreringsperioden er foretaget automatisk kalibrering på et forskelligt antal 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.

RETNINGSLINIE 40. Ved validering af 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 (Refsgaard, 2000b). Men det er dog stadig af afgørende betydning at gennemføre valideringstest mod uafhængige data. Der er forskellige muligheder herfor, f.eks.:

- 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 invers modellering, kan man på mere systematisk vis undersøge prediktionsevnen, f.eks. ved skiftevis at kalibrere mod alle datapunkter bortset fra et enkelt og herefter validere mod det uafhængige datapunkt. Denne testmetode benævnes "jackknifing".

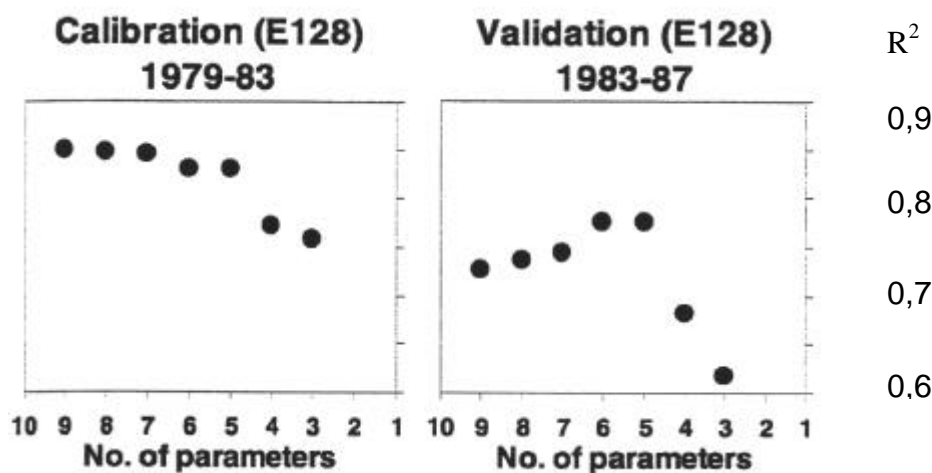


Fig. 3.3 Eksempel på en models nøjagtighed i henholdsvis kalibrerings og valideringsperiode ved valg af forskelligt antal frie parameterværdier, som tilpasses under kalibreringen (Lidén, 2000)

RETNINGSLINIE 41. Dårlige resultater i valideringen vil afdække eventuelle problemer med modellens prediktive evner (Sonnenborg, 2000b). 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. 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.

RETNINGSLINIE 42. Ved passage af milepæl 3: Review af kalibrering og validering, skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende (Refsgaard og Henriksen, 2000a):

- *Godkendelse af model kalibreringen*
- *Godkendelse af modelvalideringen*
- *Forslag til modelsimuleringer til praktisk anvendelse*
- *Forslag til overdragelse af projektresultater (slutrapport, modeldata, mv.)*

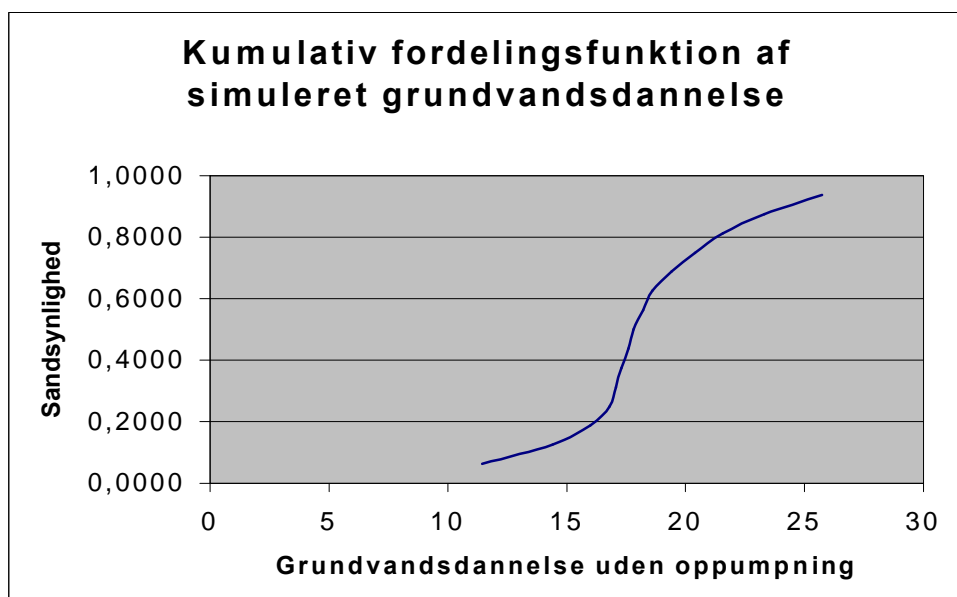
3.5 Retningslinier vedr. milepæl 4 – Model simuleringer og usikkerhedsanalyse

I forbindelse med et omfattende modelarbejde anbefales det, at der udarbejdes en standardiseret modelrapport, et "executive summary", et modelabstract og at modelsetuppet arkiveres ved indberetning til landsdækkende modelmetadatabase. Modelrapporten skal klart dokumentere omfanget af den 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.

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. 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 detaljere en regional konceptuel model med nye feltdata, 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.

RETNINGSLINIE 43. Første trin i en simulering kan være, at lave en simulering med modellen for referencekørslen (Henriksen, 2000d), så øvrige simuleringer kan sammenlignes med denne. Referencekørslen kan med fordel udvælges, så den klimatisk svarer til kalibrerings- og simuleringperioden, men med en simulering, hvor vandindvindingen nulstilles. 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 simuleringsscenerierne udarbejdes. Andet trin består i at køre modellen med 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. Disse simuleringsscenerier bør efterfølgende sammenlignes, dokumenteres og drøftes, før der gennemføres yderligere scenarier.

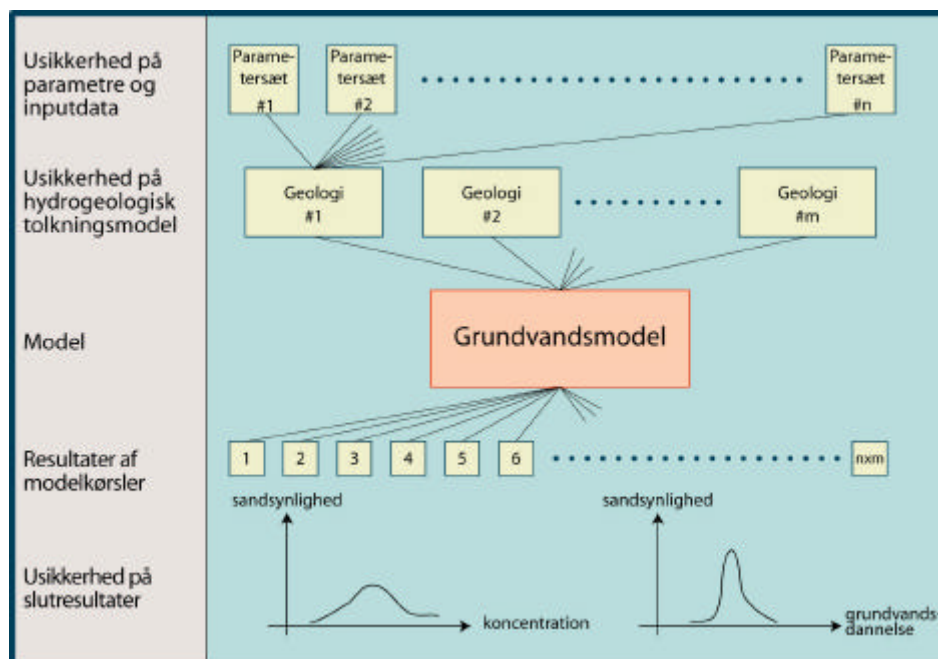
RETNINGSLINIE 44. Numeriske grundvandsmodeller kan bidrage til kvantitative beskrivelser af grundvandsdannelsen. Simulerede værdier afhænger af længden af perioden, der midles over, og starttidspunktet for simuleringperioden samt usikkerheder på bl.a. parameterverdier og konceptuel model (Henriksen, 2000d). En pragmatisk måde at løse dette problem på består i at foretage et større antal simuleringer af grundvandsdannelsen ved forskellige parameterverdier, geologiske modeller, inputdata mv. Resultaterne rangordnes og tilknyttes sandsynligheder (kumulativ fordelingsfunktion se figur 3.4). 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 simuleringperiode. Denne approach kan benyttes for et helt grundvandsmagasin eller mindre delområder indenfor modelområdet.



Figur 3.4 Eksempel på kumulativ fordelingsfunktion for grundvandsdannelsen uden oppumpning (mill m³/år). Kurven viser, at der er ca. 10 % sandsynlighed (p=0.1) for at grundvandsdannelsen er mindre end ca. 13 mill m³/år (Kilde: Henriksen, 2000d; Middlemis, 2000) og 50 % sandsynlighed (p=0.5) for at grundvandsdannelsen er mindre end ca. 18 mill m³/år.

RETNINGSLINIE 45. Ved grundvandsmodellering bør der som et minimum gennemføres følsomhedsanalyser (Henriksen, 2000d). Afhængig af opgavens målsætning bør det desuden overvejes at gennemføre mere systematiske usikkerhedsanalyser. Usikkerhedsvurderinger bør tage udgangspunkt i en vurdering og indragelse af følgende usikkerhedskilder (se figur 3.5):

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



Figur 3.5 Eksempel på håndtering af usikkerheder ved modelsimulering

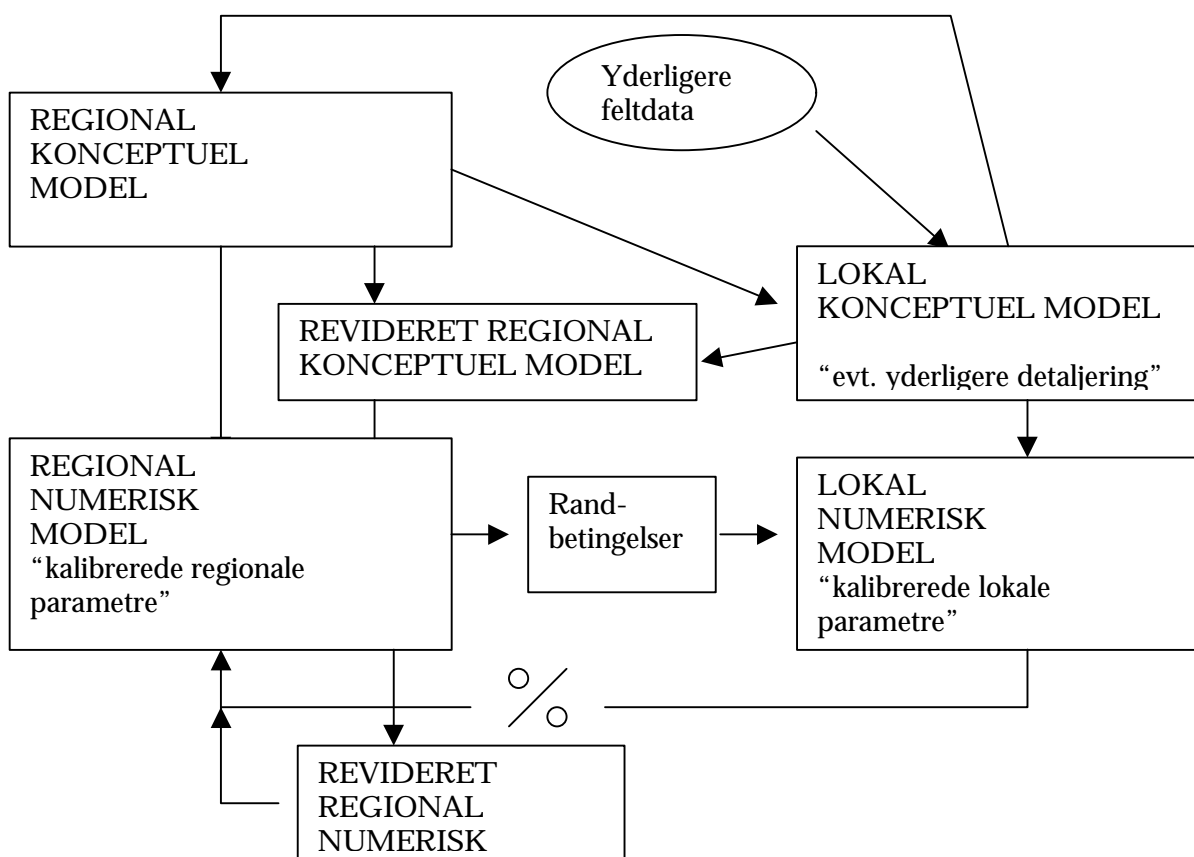
RETNINGSLINIE 46. Hvis der skal sættes usikkerheder på betydningen af geologisk tolkning, lagfølger og modellens procesbeskrivelser, anbefales det at opstille et antal alternative konceptuelle modeller. Hver af disse modeller skal så kalibreres og valideres f.eks. ved hjælp af invers modellering, således at "spændvidden" i kalibrerings- og valideringsresultatet for lige "sandsynlige" modeller kan kvantificeres. Herefter kan f.eks. ressourcens størrelse opgøres med hver enkelt konceptuelle model og betydningen heraf vurderes. Der er behov for et bedre erfaringsgrundlag, før der kan opstilles nærmere retningslinier for vurdering af usikkerheder på inputvariable og parameterverdier.

RETNINGSLINIE 47. Der anbefales i forbindelse med en detailmodellering ("high fidelity modellering") at udarbejde følgende hovedtyper på dokumentation i forbindelse med et grundvandsmodel arbejde (Henriksen, 2000e):

- 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). rapporten skal indeholde følgende afsnit (se Henriksen, 2000e) for en yderligere detaljering:
 - Rapporttitel
 - Indholdsfortegnelse, figur-, tabel- og acronymliste
 - Kapitel 1: Executive summary
 - Kapitel 2: Introduktion
 - Kapitel 3: Teknisk approach
 - Kapitel 4: Dataanalyse, geologisk karakterisering, opstilling af hydrogeologisk tolkningsmodel
 - Kapitel 5: Modelstudieplan
 - Kapitel 6: Modelopstilling
 - Kapitel 7: Kalibrering
 - Kapitel 8: Modelvalidering
 - Kapitel 9: Begrænsninger i modellen
 - Kapitel 10: Modelsimulering inkl. usikkerhedsanalyser
 - Kapitel 11: Konklusioner og anbefalinger
 - Kapitel 12: Referencer
 - Appendikser og bilag
- 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 kortfattet 2 sideres abstract, der meget kortfattet afgrænser indhold, substans og essens i et modelarbejde struktureret jf. modelprotokol (bør også indgå i modelrapport som et Appendix eller udarbejdes særskilt, hvor der ikke udarbejdes en standardiseret modelrapport)
- Modelarkivering. Indberetning af modelsetupfiler og dokumentationsmateriale til landsdækkende modeldatabase (www.metadatabase med abstracts, links mm.) på CD-rom eller lignende bør indeholde en kombination af modeljournaler, præ- og postprocesserings dataanalyser, modeldatafiler, så modellen kan "regenereres", eller indgå som grundlag for opdatering af DK-modellen (www.vandmodel.dk)

RETNINGSLINIE 48. Når man indsamler supplerende geologiske og hydrogeologiske data med henblik på opstilling af en mere detaljeret model, hvilke spilleregler er så fornuftige at følge vedr. opdatering af den regionale model med ny viden ud fra den lokale model?(Henriksen, 2000f). 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. Følgende spilleregler er dog beskrevet i figur 3.6.



Figur 3.6 Spileregler for opstilling af lokal model. Den regionale grundvandsmodel kan bidrage med randbetingelser til en lokal grundvandsmodel (f.eks. 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 (Henriksen, 2000f).

RETNINGSLINIE 49. Ved passage af milepæl 4: Review af modelsimuleringer og usikkerhedsanalyser skal der på baggrund af oplæg fra rådgiveren opnås enighed om følgende (Henriksen og Refsgaard, 2000a):

- Godkendelse af de afsluttende modelsimuleringer
- Godkendelse af usikkerhedsanalyser
- Godkendelse af overdragelsen af projektresultaterne til slutbrugeren

4. RETNINGSLINIER OM STOFTRANSPORTMODELLERING

4.1 Indledning

Stoftransportmodellering er en overbygning på grundvandsmodelleringen. Grundvandsmodelleringen beregner vandbevægelsen, og den efterfølgende stoftransportberegning er baseret på denne vandbevægelse.

Transportmodellering vil derfor sætte sine spor i formuleringen af projektet, i opstillingen af den konceptuelle model, i valget af kode samt i de resterende faser. Det er derfor valgt i denne gennemgang at anvende samme metodik til beskrivelsen af opdelingen i de enkelte faser af transportmodelleringen som anvendt til beskrivelsen af grundvandsmodelleringen jf. modelprotokollen.

Det er som sådan ikke mere kompliceret at udføre modellering af stoftransport. Men der vil være en øget usikkerhed, da processerne er mindre kendte, de betydende variable vanskeligere at måle, og stoftransportmodelleringen er baseret på grundvandsmodelleringen med dennes usikkerhed. Data, der som sådan er relateret til stoftransportmodellering, kan dog være med til at forbedre strømningsbeskrivelsen og vil derfor om ikke andet kunne øge forståelsen af grundvandsstrømningen. Dette arbejde udstikker ikke egentlige retningslinier for stoftransportmodellering, men diskuterer forskellige emner svarende til den foreslåede opdeling af de enkelte faser i grundvandsmodelleringen, se figur 2.2.

I det følgende gennemgås i de enkelte afsnit:

- Formålet med kapitlet og begreberne defineres
- Begreberne partikelbane- og stoftransportmodellering beskrives separat
- Reaktiv stoftransportmodellering
- Transportmodellering, hvor grundvandsstrømningen påvirkes af stofferne
- Anvendelsesområdet for stoftransportmodeller
- Eksisterende retningslinier for anvendelse af transportmodeller
- Specifikke forhold ved anvendelse af grundvandsmodelprotokollen i forbindelse med transportmodellering

4.2 Formål og definitioner af begreber

Transportmodellering dækker over modelleringen af en lang række processer, der medvirker til, at stoffer spredes i vandmiljøet, i dette tilfælde grundvandsmiljøet. Problemstillingen er som oftest meget kompleks, og det er ikke muligt at omfatte alle aspekter i nærværende dokument. Sammenlignet med grundvandsstrømning er der tre klare forskelle:

- transportmodellering er afhængig af grundvandsstrømningen og arver dermed usikkerheden fra grundvandsstrømningsberegningerne

- der er ikke basis for en tilsvarende konsensus om procesformuleringen, idet denne stadig er under udvikling, specielt med henblik på de stoffer, der under transporten vil blive påvirket af forskellige reaktive processer
- transporten af stoffer kan medføre en påvirkning af strømningsprocessen, enten ved en ændring af densiteten eller viskositeten af grundvandet eller ved en påvirkning af den geologiske formation ved for eksempel borttransport eller udfældning af materialer.

Grundet denne øgede kompleksitet vil specielt formuleringen af den konceptuelle model være mere tidskrævende samt kræve en bedre dokumentation end ved formulering af den konceptuelle model for grundvandsstrømning. Uagtet denne forskel er det interessant at gennemgå, hvorvidt den metodik, der anvendes i forbindelse med opstilling af en grundvandsmodel, er direkte anvendelig ved transportmodellering, herunder at udpege behovet for udarbejdelse af specifikke retningslinier for stoftransportmodellering.

4.3 Hvad dækker begreberne partikelbane- og stoftransportmodellering over?

I forbindelse med transportmodellering anvendes begreberne partikelbane modellering og stoftransportmodellering. Begge metodikker dækker over løsning af den samme grundlæggende transportligning, og ved forskellige kunstgreb er det muligt at lave præcist de samme analyser med de to modeltyper. Som det vil fremgå af nedenstående, er forskellen ikke så stor, men da begreberne ofte anvendes, er det nødvendigt at præcisere, hvad de dækker over. Reaktiv transportmodellering er en underart af begge metodikker og bliver beskrevet i et separat afsnit.

4.3.1 Partikelbane modellering

Begrebet dækker over en metodik, hvor man ved hjælp af grundvandsstrømningen beregner, hvorledes en suspenderet partikel vil transporteres. I litteraturen kaldes denne metodik for "Lagransk". Der findes en række underarter, som nogenlunde dækkes af den følgende beskrivelse på trods af deres forskelligheder.

Det forudsættes, at partikelintensiteten ikke påvirker strømningsmønstret, og partikelbaneberegningerne kan således gennemføres efter strømningsberegningerne. Strømningsberegningerne er typisk udført i et beregningsnet, hvis geometri partikelbaneberegningerne også anvender. Beregningerne initialiseres ved at fastsætte, hvor og hvornår partikler introduceres. Efter introduktionen vil partiklen blive flyttet i tiden i forhold til porevandshastighedsvektoren. Det er således nødvendigt at specificere porøsiteten, og - i det tilfælde den ikke er konstant - dens variation i rummet. Ved mere avancerede modeller er det muligt også at inkludere dispersion ved yderligere at flytte partiklerne stokastisk i forhold til dispersionsstørrelserne.

I løbet af beregningerne vil partiklens position samt tidspunktet blive gemt, og det er efterfølgende muligt at udtrække disse informationer for hver enkelt partikel. Det er således muligt at bestemme dels dens position til et givent tidspunkt, dels hvor lang tid den har været om at komme dertil, altså partiklens alder. Denne funktionalitet anvendes ofte til at modellere grundvandets alder. Dette gøres typisk ved at anvende et stationært

strømningsbillede og så introducere partikler på overfladen af modellen, således at de følger infiltrationen. Efterfølgende er det muligt for et givent område at udtrække, hvor lang tid partiklerne har været om at komme fra overfladen ned til det pågældende område. Grundvandets alder kan dernæst beregnes ud fra en gennemsnitsbetragtning. Ligeledes er det muligt at observere alder samt oprindelsessted for partikler, der indvindes i en boring. På den måde er det muligt at optegne et tredimensionalt opland til den pågældende boring. Denne metodik kan forfines ved at vende strømmingen og så udsende partikler fra boringen. Typisk vil disse øvelser blive foretaget på et stationært strømningsbillede, men metodikken kan udmærket anvendes på et ikke stationært strømningsbillede. Dette kræver dog mere computerkraft. Ved anvendelse af ikke stationære kørsler kan indvindingsoplandets udstrækning kortlægges som funktion af eventuelle årstidsvariationer eller andre tidlige variationer.

Udover at partiklerne kan kortlægge alder og strømningsveje, er det også muligt at tildele hver partikel en vis masse, eksempelvis 1 gram. Ved at tilsætte en passende mængde partikler, evt. som en punktkilde, er det efterfølgende muligt at beregne gennemsnitskoncentrationen i et givent område til en given tid ved at summere alle de partikler, der er til stede i området på den givne tid.

Reaktive processer kan indbygges ved at lade partikler transporteres langsommere, hvis de er udsat for adsorption, samt ved at lade deres masse aftage, hvis de er udsat for nedbrydning.

4.3.2 Stoftransportmodellering

Begrebet dækker over en metodik, hvor man ved hjælp af grundvandsstrømmingen beregner, hvorledes suspenderet stof vil blive transporteret. Dette tager ofte udgangspunkt i en finit differens eller finit elementløsning af den grundlæggende transportligning. I litteraturen kaldes denne metodik "Eulersk". Forskellen mellem de forskellige underarter er så beskeden, at en separat håndtering ikke er nødvendig.

Metodikken løser transportligningen direkte og vil som resultat give koncentrationsniveauet i hver enkelt beregningscelle som funktion af tiden. Den drivende kraft er porevandshastigheden, og porøsiteten skal således angives. Metodikken kan anvendes ved forskellige kunstgreb til at beregne alder samt oplande til boringer. Den vil dog primært være relevant, hvor forskellige reaktive processer ønskes beregnet på, eller ved specifikke scenarier, hvor koncentrationsniveauet ønskes bestemt.

4.3.3 Sammenligning af metoderne

Partikelbane simuleringer er mest velegnet til beregning af strømningsveje og grundvandsalder. Hvis man i givne scenarier ønsker koncentrationsniveauet af specifikke stoffer beregnet, vil der være et overlap mellem det optimale i at anvende partikelbane modeller og stoftransportmodeller. Hvor der skal beregnes på mere komplicerede reaktive processer, er stoftransportmodellen den foretrukne metodik. Det er dog vigtigt at pointere, at hvis modellerne anvendes korrekt og finkalibreres til den enkelte anvendelse, vil de generere det samme resultat, selvfølgelig afhængigt af den usikkerhed, der er på input parametre og formulering af den konceptuelle model. Se yderligere diskussion i afsnit 4.9.3 Valg af kode.

4.4 Reaktiv stoftransportmodellering

I forbindelse med anvendelse af transportmodeller er det ofte ønskeligt at beregne, hvorledes reaktive stoffer, der adsorbere og/eller er bionedbrydelige, vil transporteres. Disse beregninger adskiller sig fra det ovenstående ved, at procesbeskrivelserne varierer helt specifikt med problemstillingen. Der er desuden en stor variation i, hvorledes specifikke reaktive processer formuleres, blandt andet afhængigt af vidensniveauet omkring den pågældende proces. Der bør derfor ved anvendelse af denne type beregninger fokuseres på den valgte formulering samt dennes validitet. Herved adskiller denne type modellering sig fra grundvandsmodellering og transportmodellering af konservative stoffer, hvor fokus hovedsageligt er rettet mod parametrisering, formulering af randbetingelser, samt på hvorledes usikkerheder i disse vil påvirke resultatet.

4.5 Transportmodellering, hvor grundvandsstrømningen påvirkes af stofferne

Hvis densiteten varierer for meget, vil dette kunne påvirke strømningsbilledet. Denne påvirkning medfører, at vandet med en høj densitet vil synke ned mod bunden af grundvandsmagasinet. Ligeledes kan viskositet også indvirke på strømningsbilledet. Det er ikke muligt at udstikke specifikke retningslinier for, hvor høj densiteten skal være, før det indvirker på strømningen. Her må der henvises til litteraturen. I det øjeblik man ønsker at inddrage disse aspekter, arbejdes der med et andet sæt styrende processer. Der er ikke diskuteret i detaljer hvorledes sådanne typer af modeopgaver kan håndteres men umiddelbart forventes det at disse også i hovedtræk kan benytte denne gennemgang. Der vil dog naturligvis være specielle forhold omkring metodikker til løsning af ligningssystemer samt andre kodespecifikke detaljer, der vil være anderledes.

4.6 Anvendelsesområde

Generelt har der været to forskellige typer anvendelse af transportmodellering. Den ene type er rette imod at forudsige spredning af stoffer fra specifikke kilder i specifikke grundvandsmagasiner. Denne type beregninger kan sammenfattende kaldes sted-specifikke beregninger. Den anden type er af en mere generisk natur. Ved at beregne, hvordan et modelstof bliver transporteret i et generisk grundvandsmagasin, udstikkes retningslinier for tilladelige kildestyrker.

4.7 Retningslinier for anvendelse af transportmodeller

Der eksisterer i dag retningslinier udarbejdet af blandt andet ASTM og EPA-Californien. Samtidig er der mange steder igangværende arbejder, der afsluttes inden for en kort periode, eksempelvis "Strategy for the Development of an Improved Agency Capability in Decision-Making Involving Modelling of Contaminant Fate and Transport in the Subsurface" fra National Groundwater and Contaminated Land Centre, England. Mange af disse retningslinier tager udgangspunkt direkte i de samme metodikker som anvendt ved grundvandsmodellering. Anbefalingerne i retningslinierne er generelt af overordnet karakter og forholder sig ikke til detaljer omkring de tekniske aspekter, der er forbundet med stoftransportmodellering. Sammenfaldende for retningslinierne er dog,

- at man skal forholde sig til det faktum, at stoftransportmodellering tager udgangspunkt i grundvandsmodellering og som sådan vil arve alle de usikkerheder og fejl, der er introduceret her,
- at stoftransportmodellering stiller krav til grundvandsmodelleringen, specielt angående formuleringen af den konceptuelle grundvandsmodel og opstilling af det numeriske net, samt ved kalibrering og validering, samt
- at stoftransportmodellering kræver opstilling af en konceptuel stoftransportmodel, som med introduktionen af nye parametre og variable vil have samme behov for parametrisering og dokumentation som grundvandsmodellering.

4.8 Specifikke forhold ved protokol i forbindelse med transportmodellering

Der synes at være mange fordele ved at anvende samme procedure for stoftransportmodellering som ved grundvandsmodellering. Anvendelsen af samme fremgangsmåde vil lette arbejdsprocessen, idet det således ikke er nødvendigt at forklare, hvad de enkelte processer dækker over. Afrapporteringen kan følge samme mønster. Dette øger læsbarheden og letter forståelsen, også for personer, der ikke normalt arbejder med modellering. I det følgende gennemgås de elementer, der indgår i grundvandsmodel protokollen, se Figur 2.2 og specielle krav til nogle af elementerne i modelprotokollen for grundvandsmodellering.

4.8.1 Definition af modelformål

Det er vigtigt at afgrænse, hvilke typer af resultater der ønskes - altså formålet med modelleringen. Typisk kan der inddeles i tre formålstyper: 1) at øge forståelsen for de forskellige processer involveret i stoftransport med et videnskabeligt formål for øje, 2) at undersøge eksisterende observerede forureninger for at kortlægge kilden, udbredelsen samt mulige eksponeringsveje, samt 3) at estimere den fremtidige udbredelse under forskellige scenarier, eventuelt indeholdende en oprensings- eller afværgeteknologi.

Uanset hvilke kategorier formålet ligger indenfor, vil formuleringen af et klart formål sikre, at det efterfølgende arbejde med opstilling af den konceptuelle model, valg af kode, opsætning osv. vil foregå med dette for øje. Formålet kan ændre sig løbende under projektet i takt med den forståelse, som modelleringen samt feltdata genererer. Hvis formålet ændrer sig, er det vigtigt at gennemgå de forskellige trin for at sikre, at den anvendte metodik også er gyldig i forhold til det ændrede formål.

4.8.2 Konceptuel model

Opstillingen af den konceptuelle model tager i første omgang udgangspunkt i en bearbejdning af tilgængelige data. Opstilling af den konceptuelle model for grundvandsmodellering og stoftransportmodellering må foretages sideløbende og strengt koordineret. Koordineringskravet skal således omfatte formulering af vandbevægelse og den relaterede stoftransport i modellen. Det skal sikres, at kilder til stoftransport i modellen inkluderes på en måde, der sikrer, at formålet med modelleringen overholdes. Hvis man eksempelvis ønsker at modellere, hvorledes stofudvekslingen mellem vandløb og grundvand vil finde

sted, må man nødvendigvis lave en konceptuel model for både vandudveksling og stofudveksling mellem grundvand og vandløb.

Hvor det er muligt, kan det være en fordel at udarbejde den konceptuelle model sideløbende med egentlige simuleringer af systemet. I forhold til den endelige konceptuelle model kan disse simuleringer være simple, hvis man ønsker eksempelvis at kvantificere betydningen af specifikke processer i forhold til hinanden, eller komplekse i det omfang, man ønsker at undersøge konsekvensen ved en simplifikation af den konceptuelle model. Disse simuleringer kan udmærket udføres ved anvendelse af værktøjer, der ikke inkluderer alle processerne. Dette er specielt relevant ved opstilling af en konceptuel model for reaktive stoffer. Her kan en forundersøgelse med anvendelse af forskellige procesbeskrivelser for de reaktive processer med baggrund i forskellige forsimplede antagelser vedrørende grundvandsstrømning og -transport medvirke til en bedre forståelse af problematikken.

I mange tilfælde kan det være en fordel at operere med forskellige konceptuelle modeller afhængigt af, hvor man befinder sig i grundvandsmodellen. Eksempelvis vil modellering af nitratnedsivning kræve en meget detaljeret beskrivelse af de processer i den umættede zone, der leder til nitratnedsivning til grundvandet. Ved denne procesbeskrivelse kan man forestille sig, at man inddrager dyrkningspraksis, jordens forskellige organiske puljer, årstidens temperaturvariationer og andet i den konceptuelle model. Denne konceptuelle model er ikke beskrivende for, hvad der sker i det dybereliggende grundvand, og her vil man vælge at anvende en anden model, der måske er baseret på jorden indhold af forskellige nitrat-reducerende mineraler. Tilsvarende kan man forestille sig, at modelleringen af et benzinudslip vil medføre, at der nær kilden vil være meget høje benzinkoncentrationer og systemet vil være kontrolleret af flerfase strømning, udveksling med luft og meget andet. Længere fra kilden, hvor forureningskoncentrationen er meget lavere, kan det måske være en bedre ide at anvende andre formuleringer af processerne for på den måde at inddrage grundvandets redoxforhold samt andre aspekter. I mange tilfælde vil det være relevant med flere konceptuelle modeller, ikke alene for den enkelte proces, men også for de enkelte områder i grundvandsmodellen.

Tilsvarende kan der arbejdes med forskellig kompleksitet i strømningsmønstret. Eventuelt kan man starte med at modellere stoftransport under stationære strømningsforhold, dette kan senere udvides til ikke stationære strømningsforhold. Ved denne trinvis kompleksitetsforøgelse er det i højere grad muligt at kommentere og diskutere de forskellige fænomener observeret. Et eksempel på dette kan findes i Miljøprojekt Nr. 467.

4.8.3 Valg af kode

Valget af transportkode afhænger af modelleringsformålet og dermed den valgte konceptuelle model. Nedenstående betragtninger kan indgå som supplement til beskrivelsen af valget af grundvandskode.

Kobling med grundvandskode

Da transportmodelleringen som input skal bruge strømningshastigheden, er det nødvendigt at sikre, at transportkoden kan samarbejde med resultatet fra strømningsberegningerne på en lidet ressourcekrævende måde.

Grundvandskoden kan typisk i sin opbygning beskrive flere vandudvekslingsmuligheder, end transportkoden kan håndtere mht. stofudvekslingsmuligheder. Eksempelvis kan de fleste grundvandskoder beskrive ind- og udstrømning af vand til eller fra en sø, mens det er de færreste, der kan inkludere stoftransporten mellem sø og grundvand. Det er derfor vigtigt at afdække, om koblingen mellem grundvandskode og transportkode kan indvirke på opfyldelsen af formålet med modelleringen.

Behovet for partikelbanesimuleringer og stoftransport

Partikelbanesimuleringer er mest velegnede til beregning af borings-/kildepladsoplande samt overslagsberegninger på opholdstider og dermed transporttider for forureningsstoffer. Hvis dette er modellens formål (delvist eller helt), er det nødvendigt, at transportkoden kan beregne partikelbaner samt håndtere den efterfølgende statistiske behandling af resultaterne således, at de ønskede resultater kan genereres. Såfremt der er ønsket at beregne transport af forureningsstoffer, kan følgende betragtninger gøres gældende ved valg af løsningsmetode:

Hvis det er muligt at diskretisere tilstrækkeligt fint, er det en fordel at vælge en finite element- eller finite differens baseret kode (Eulersk). Denne metodik er generelt mere effektiv og fleksibel end partikelbane baserede koder (Lagransk). Hvis beregningsnettet er fint nok, vil denne type koder ikke have problemer med numerisk dispersion og numerisk instabilitet. Omvendt vil et fint beregningsnet give større beregningstider og eventuelt et større arbejde med parameteriseringen.

I mange tilfælde er det ikke muligt at arbejde med et tilstrækkeligt fint net. Det vil stille for store krav til computerkapaciteten. Dette forstærkes af, at de fleste transportkoders beregningsnet er sammenfaldende med grundvandsmodellens. En forfining af beregningsnettet vil således spille ind på diskretiseringen allerede i grundvandsmodellen. Hvis dette ikke er ønskeligt, kan man anvende en Lagransk-baseret kode, eventuel en blandet Eulersk-Lagransk-kode. Disse har typisk ikke så store krav til diskretiseringen.

Præcisionen af Lagransk- eller delvist Lagransk-baserede koder svinger, hvis beregningsnettet er meget irregulært. Her vil Eulersk-baserede koder være bedre. Irregulære net anvendes typisk mest i finite element baserede koder, hvor man anvender sofistikerede beregningsnet udformninger for at sikre en så god beskrivelse af grundvandsstrømningen som mulig. Lagransk-baserede koder vil i modeller, hvor der er mange zoner med vand uden væsentlig strømning, være påvirket af numeriske problemer.

En ren Lagransk kode anvendt til stoftransport modellering vil være sensitiv overfor antallet af partikler. Hvis antallet af partikler er for lavt, vil resultatet være meget groft og mangelfuldt. Omvendt anvender de blandede formuleringer ikke direkte massebalanceligningen, og de kan derfor give massebalance fejl.

Tabel 4.1 Sammenligning af Lagransk- og Eulersk-baserede koder.

	Lagransk	Eulersk	Blandet
Diskretisering	Kan håndtere grovere diskretisering	Kræver fin diskretisering for at undgå numerisk dispersion og instabilitet	Kan håndtere grovere net
Netgeometri (simpel)	Kræver simpel geometri	Kan håndtere kompliceret geometri	?
Massebalance fejl	Afhængigt af partikelmængden	Ikke noget generelt problem	Potentielt problem

Udover de ovennævnte betragtninger adskiller koderne sig ved de muligheder, der er for at formulere forskellige reaktive processer. De Eulersk-baserede koder vil typisk have det største udvalg af forskellige procesformulerings muligheder.

Behovet for reaktive processer

De fleste transportkoder har mulighed for at beskrive adsorption og nedbrydning af enkeltkomponenter. Et udvalg af disse har desuden mulighed for at anvende distribuerede værdier for de reaktive parametre. Et lille udvalg af koder har mulighed for meget avancerede reaktive procesbeskrivelser. Udfra valget af procesbeskrivelse i den konceptuelle model kan der således udvælges en kode. Som beskrevet i afsnittet om valg af den konceptuelle model, kan det være nyttigt at anvende forskellige grader af kompleksitet som et led i opbygningen af den konceptuelle model. Det kan således være nødvendigt at operere med flere koder i løbet af denne proces. Hvis man også ønsker at anvende forskellige konceptuelle modeller i samme grundvandsmodel kan det være nødvendigt at belyse dette, ved at lave flere på hinanden følgende beregninger, hvor resultatet fra den ene beregning anvendes som input til den næste beregning. Hvorvidt det er muligt at anvende en specifik kode til sin konceptuelle model for de reaktive processer, kan derfor være en forholdsvis kompliceret proces. Denne proces kan bedst foretages ved at forsøge sig frem med sin konceptuelle reaktive model i et simplificeret transportsystem.

Der er i denne sammenhæng i det tidligere kapitel nævnt to koder, MIKE SHE og MODFLOW. Disse to koder adskiller sig ved, at MIKE SHE er en specifik kode hvorimod MODFLOW dækker over en række koder der tager udgangspunkt i den samme kerne. I det følgende gennemgås kort de beregnings muligheder der er med de to koder. Der tages udgangspunkt i MODFLOW96, da den er udviklet af USGS der indtil nu formulerer MODFLOW kernen.

Der findes et godt udvalg af transportkoder der er bygget til at anvende strømningeberegninger foretaget med MODFLOW96. Disse er ved at blive opdateret således de også kan anvendes med MODFLOW2000, det sidste skud på stammen. I usorteret rækkefølge kan nævnes MT3D, denne stoftransportkode har mulighed for at vælge mellem 4 forskellige løsningsmetoder, en ren Lagransk, en modificeret Lagransk, en hybrid mellem de to første løsninger samt en standard (Eulersk) finit differens løsning. MODPATH og PATH3D, to koder til partikelbane simuleringer. MODFLOWT svarende til MT3D, dog med færre muligheder for at vælge forskellige løsningsmetoder, MODFLOW-SURFACT der er udviklet til at beskrive transport af stoffer både under umættede og mættede forhold. Disse

koder, samt mange andre findes detaljeret omtalt på internettet, klik ind under www.usgs.gov, www.scisoftware.com eller www.epa.gov. Alternativt kan man søge på kode navnene, så vil man typisk kunne finde genveje til producenterne, hvor man kan købe dem, diskussionsfora og meget andet.

MIKE SHE har et AD og et PT modul, disse havne dækker over en stoftransportkode og en partikelbane kode. AD modulet er baseret på en Eulersk løsning.

Til MODFLOW findes mange offentligt tilgængelige ("public domain") koder MT3D eksempelvis. MIKE SHE koden er kommerciel tilgængelig via www.dhi.dk og indeholder et grafisk interface. Typisk skal man ved en MODFLOW baseret kode købe et grafisk værktøj. I de fleste tilfælde vil grafiske værktøjer til MODFLOW strømningskoden også kunne håndtere interface til nogle udvalgte transportkoder.

4.8.4 Test af kode

Udover at koden selvfølgelig skal være veldokumenteret, skal den også regne rigtigt. For de fleste koders vedkommende vil der være udført sammenlignende beregninger med analytiske løsninger. For de fleste koders vedkommende vil det ligeledes være specificeret hvilke diskretiseringskrav, der skal overholdes, for at koden arbejder tilfredsstillende. Overholdelsen af disse krav kan være indbygget i koden; alternativt giver koden en advarsel under kørslen.

Koder med avanceret reaktiv procesbeskrivelse kan ikke i samme udstrækning verificeres med analytiske løsninger. Disse er typisk delvist verificeret ved gennemregning af eksempler, hvor resultatet diskuteres ud fra en forventning om resultatet, eller alternativt sammenlignet med en anden kode med tilsvarende procesformuleringer. Anvendelse af denne type koder kræver mere af brugeren, idet afgrænsning af en sådan kodes valide anvendelsesområder er svær. Koden er således ikke verificeret til enhver type af procesformuleringer. Det er op til kodebrugeren at formulere og gennemføre verifikationsberegninger i det omfang, det er nødvendigt.

4.8.5 Modelopsætning

Parametrisering

Modelopsætning består for stoftransportmodellens vedkommende blandt andet i at indlægge randbetingelser samt parametre i den valgte transportkode. De fleste koder kræver, at man anvender samme beregningsnet som anvendt ved grundvandsmodelleringen. Dette arbejde er meget lig arbejdet med at parametrisere grundvandsmodellen og vil som sådan ikke blive diskuteret yderligere. Afhængigt af den valgte kode vil der yderligere være et behov for at specificere forskellige beregningskontrollerende parametre. Det kan dreje sig om antallet af partikler, konvergenskriterier, parametre til automatisk beregning af tidsskridt og andet.

Diskretisering

De fleste koder arbejder med samme beregningsnet til strømnings- og transportberegning. Transportberegninger vil typisk stille de største krav til diskretiseringen. "Peclet-tallet" er et diskretiseringskrav, der er formuleret til en speciel løsningsmetodik (Eulersk med "central weighting"). Peclet-tallet beregnes med $\Delta x/\alpha_L$, hvor Δx dækker over diskretiseringen, og α_L er den langsgående ("longitudinale") dispersivitet. For én-dimensionale

problemstillinger kan det eftervises, at hvis Peclet-tallet er under 2, giver det acceptable resultater. I fler-dimensionale problemstillinger er der ikke tilsvarende baggrund for at angive præcise værdier for Peclet-tallet. En anden størrelse er Courant-tallet, der udtrykkes som $v\Delta t/\Delta x$, hvor v er porevandshastigheden, og Δt er tidsskridtet. Typisk vil Courant-værdier på under 1 generere acceptable resultater. Courant-tallet er heller ikke en garant i fler-dimensionale scenarier. Peclet kriteriet vil foreslå en fin diskretisering, og Courant tallet vil efterfølgende foreslå, at tidsskridtet skal sættes tilsvarende ned. Den styrende parameter for den stedlige og den tidsmæssige diskretisering er således den longitudinale dispersivitet. Det kan derfor være en fordel tidligt i projektet at teste, om den diskretisering, der er valgt i grundvandsmodellen, kan anvendes i den efterfølgende stoftransportmodellering.

En grundvandsmodellering kan i mange tilfælde beskrive strømningen tilfredsstillende med ganske få vertikale lag. Dette er tilfældet, fordi strømningen hovedsageligt er horisontal. Ved stoftransport er det nødvendigt med en fin vertikal diskretisering for at undgå, at fanen bliver urealistisk fortyndet. Ved en Eulersk metode vil der kun blive beregnet én koncentration pr. beregningscelle. Hvis denne celle således er 10 meter høj, vil dette betyde, at der momentant ved stoftilførsel vil ske en fortynding i vertikalen med en faktor 10. Dette kan omgås ved en finere diskretisering i vertikalen. Alternativt vil en Lagransk metode kunne beregne det mere præcist, idet en partikels position ikke er udtrykt i forhold til en beregningscelle men med X-Y-Z koordinater. Det er således muligt at udtrække "koncentrationen" uafhængigt af beregningsnettet. Det skal dog sikres, at man anvender en kode, der har denne facilitet. De fleste koder kan kun udtrække partikelpositioner defineret ud fra beregningskasser.

Testkørsler

For at sikre, at diskretiseringen er tilstrækkelig med den anvendte løsningsmetode (Eulersk, Lagransk eller blandet), anvendes testkørsler med modellen. Da modellen er sted-specifik og sandsynligvis rent strømningsmæssigt ikke ligner noget, for hvilket der findes analytiske løsninger for stoftransport, må man anvende scenarier, for hvilke løsningen er kendt. Disse scenarier kan være afhængige af den enkelte opsætning, men typisk vil det være muligt at lave dem som beskrevet nedenfor.

- a) Bibeholdelse af koncentrationsniveau. Modellen sættes op med en start-koncentration overalt på en enhedsværdi, eksempelvis 100. Alle randbetingelser, stationære eller ikke stationære, sættes til at have en koncentration på 100. Resultatet er givet; modellen bør beregne, at koncentrationsniveauet overalt er 100 til enhver tid. Typisk vil beregningsresultaterne afvige fra det forventede resultat med 1-2%, størst i områder tættest på randbetingelserne. Denne metodik vil være beregningskrævende for Lagransk-baserede koder.
- b) Fra et koncentrationsniveau til et andet. Modellen har samme start-betingelser som a) men har i alle randbetingelser en anden værdi, eksempelvis 200. Det forventede resultat er, at alle beregningsceller vil tiltage i koncentrationsniveau og ligge i intervallet 100 til 200. Alle celler bør tangere mod værdien 200 og ikke på noget tidspunkt opleve faldende værdier. Beregningsresultaterne vil afsløre, hvorvidt der er numerisk dispersion eller tendenser til numerisk støj i resultatet. Sandsynligvis vil der være områder med koncentrationsniveauer over 200 og under 100, specielt ved frontens udbredelse.

- c) Opfyldning af modellen. Samme som b) men med en start-koncentration på 0. På den måde vil det afsløres, hvordan koden håndterer det, at den beregnede koncentration kommer under 0 og altså har en negativ værdi. Nogle koder vil runde denne værdi op til 0 og dermed lave en massebalancefejl, andre vil operere med denne negative værdi, men vil gemme den som 0 eller alternativt plote den som 0 ved en grafisk udtrækning.
- d) Tømning af model. Modellen starter med den samme initiale koncentration overalt, og samtidig sættes alle randbetingelser til at have koncentrationen 0. Denne kørsel vil minde meget om c), men kan være mere illustrativ. Specielt vil den afsløre, om der er zoner i modellen, hvor der praktisk taget ikke er grundvandsstrømning.

Ovenstående kørsler kan varieres alt efter behovet, eksempelvis kan man vælge at afprøve den i forskellige perioder, hvis der arbejdes med en tidsvarierende grundvandsstrømning. I det tilfælde at de observerede fejl er uacceptable, må modellen revideres. I første omgang kan man prøve at ændre på beregningsmetodens parametre, konvergenskriterier, antal partikler eller andet. Alternativt kan man anvende mindre tidsskridt. Ved anvendelse af mindre tidsskridt er det vigtigt også at kontrollere de tidsskridt, der er anvendt ved lagringen af grundvandsstrømningen. Det kan være nødvendigt at lagre grundvandsstrømningsdata med finere interval. Hvis dette slår fejl, må det overvejes at ændre på diskretiseringen. Dette vil dog for de fleste modellers vedkommende medføre, at også grundvandsmodellen skal ændres. Dette er forholdsvis tidskrævende.

4.8.6 Nøjagtighedskriterier

En stoftransportberegning vil give resultater i form af koncentrationsniveauer for hver enkelt beregningspunkt og for hvert enkelt tidsskridt. Et nøjagtighedskriterium til denne type modeller kan altså formuleres i form af

- a) En maksimal acceptabel afvigelse fra en observeret koncentrationsværdi
- b) Ankomsttidspunktet (opholdstiden)
- c) Massebalance

Generelt for stoftransportmodellering er datagrundlaget meget sparsomt. Selv for kontrollerede tracerforsøg på 20 x 40 meter skala med utallige "multi-level" borerer med et for de fleste projekter urealistisk højt antal analyser er det ikke muligt at lave en præcis massebalance. Overføres dette til et projekt, der opererer med ganske få borerer - 10-15 i et opland i størrelsesordenen 500x1000 meter - vil resultaterne fra stoftransportmodelleringen kun kunne anvendes kvalitativt. Formuleringen af nøjagtighedskriterierne bør derfor være af en mere kvalitativ natur, og en eventuel overskridelse af nøjagtighedskriteriet bør ikke nødvendigvis medføre en diskvalifikation af modellen. Da koncentrationsniveauet typisk vil variere stærkt i modellen, kan der med fordel anvendes normerede nøjagtighedskriterier, eventuelt opgivet i forhold til kildestyrken eller "halen" af en forureningsfane alt efter hvilket, der har den højeste interesse.

Der bør opstilles forskellige nøjagtighedskriterier for stoffer, der transporteres konservativt, (klorid, bromid) og stoffer, der potentielt indgår i forskellige tilbageholdelses- og omdannelsesprocesser (organiske stoffer, ilt, nitrat).

Ved partikelbanesimuleringer kan man beregne grundvandets alder. Aldersdatering er mulig med forskellig præcision afhængigt af metoden.

Udover de mere direkte aldersdateringsmetoder er det også muligt at anvende mere indirekte parametre såsom fundet af pesticider, som har været anvendt i en specifik periode. Det er således naturligt at fastsætte nøjagtighedskriterier til denne type simuleringer ud fra den simulerede alder.

For at sikre, at transportberegningen er foretaget på et rigtigt strømningsgrundlag, er det nødvendigt at specificere nøjagtighedskriterier til grundvandsmodellen. For transportmodellen er det bydende nødvendigt, at vandet strømmer i den rigtige retning. Kriterierne skal således indeholde informationer, der er rettet mod nøjagtigheden af strømningsretningen - altså til de observerede gradienter.

Hvor meget massemodellen forudsiger, der er til stede, er meget vanskeligt at verificerer. Det er derfor vanskeligt at lave et nøjagtighedskriterium til massefluxen fra eksempelvis grundvand til overfladevand eller tilstrømning til en indvindingsboring.

I forbindelse med afviklingen af de endelige modelberegninger skal det forsøges i så vid udstrækning som muligt at kontrollere kvantitativt, og hvis dette ikke er muligt kvalitativt simuleringseresultaterne. Der kan ikke udarbejdes konkrete retningslinier for dette arbejde, da modellens anvendelse og kompleksitet vil være styrende for en sådan vurdering. Som et eksempel på en kvantitativ og kvalitativ vurdering er der taget udgangspunkt i et ønske om at kontrollere beregningsresultaterne fra en bestemmelse af oplandsgrænser ved hjælp af en partikelbane model. Umiddelbart vil det for partikelbane simuleringer hvor formålet er at fastlægge oplandsgrænser for en specifik indvindingsboring være muligt at sammenligne den oppumpede vandmængde med infiltrationen i oplandsområdet. Disse to størrelser vil for stationære kørsler være identiske og for ikke stationære kørsler være sammenlignelige. Afvigelser vil i det første tilfælde skyldes den tilnærmelse man anvender ved at anvende en vist antal partikler, i princippet vil et øget antal partikler altid øge beregningsnøjagtigheden, og i det andet tilfælde af oplandsgrænsen kan ændres i hvert enkelt tidsskridt.

Stoftransport simuleringerne kan også kontrolleres ved hjælp af kvalitative betragtninger omkring porevandshastighed samt den simulerede stoftransport eventuelt i form af forureningsfanens ankomst tidspunkt til en observationsboring.

Det forslås at massebalance informationer altid lagres og rapporteres, da sådanne observationer altid er en god indikator for hele beregningsnøjagtigheden. Sammen med denne rapportering vil det være relevant at kort gennemgå hvilke beregningsmetoder, der er valgt, samt eventuelle relaterede parametre.

4.8.7 Modelkalibrering

Ved kalibrering af transportmodellen kan der varieres på følgende:

- Grundvandsmodellen vil generere strømningsbilledet og dermed være afgørende for transportberegningerne. Selve hastigheden kan kalibreres ved ændringer af porøsiteten, mens den overordnede strømningsretning ligger fast fra grundvandsmodellen.
- Kildebeskrivelse vil typisk dække over beskrivelsen af hvor og hvor meget, der vil tilstrømme grundvandsmagasinet af forureningskomponenter;

alternativt hvor meget af det tilstedeværende, der skal vaskes ud, fortyndes eller nedbrydes.

- Porøsiteten vil afgøre, hvor hurtigt porevandet vil strømme, idet porevandshastigheden beregnes som hastigheden af grundvandsstrømningen divideret med porøsiteten. Det er således muligt at variere porøsiteten for på den måde at justere strømningsberegningen. Denne justering skal foregå inden for værdierne af den pågældende jordtype, der fastsættes porøsitetsværdier for. Alternativt tilrådes det at justere på grundvandsmodellen.
- Dispersivitet beskriver, hvorledes en forureningsfane vil spredes som funktion af strømningsformen i et porøst og heterogent medie. Afhængigt af hvilken skala man vælger at estimere værdien på, vil den også indeholde variationen i hydraulisk ledningsevne. Fastsættelse af denne værdi er derfor afhængig af, hvordan man har håndteret sin heterogenitet i den hydrauliske ledningsevne. Hvis man anvender samme ledningsevne i et helt beregningslag, vil det være nødvendigt at anvende en højere dispersivitet for at korrigere for den småskala-heterogenitet, der altid vil være til stede. Omvendt vil en indbygning af småskala-heterogenitet i den hydrauliske ledningsevne medføre, at der skal anvendes en mindre dispersivitet. De to beregninger vil medføre den samme transport af masse midtpunktet; dog vil metoden med lav dispersivitet og indbygning af småskala-heterogenitet medføre en større forskel i koncentrationsniveauet, idet strømningen vil foregå i en geometrisk mindre del af grundvandsmagasinet. Metoden vil altså generere højere koncentrationsniveauer men i mindre områder sammenlignet med en metode, hvor man lader småskala-heterogenitet indgå i dispersivitetsværdien. I dette tilfælde vil stoffet blive fordelt mere regelmæssigt geometrisk i grundvandsmagasinet, hvilket giver lavere koncentrationsniveauer.
- De reaktive parametre beskriver, hvorledes et stof under transport vil tilbageholdes eller omdannes. Disse parametre vil være meget vanskelige at bestemme, idet litteraturværdier er meget sted-specifikke. Generelt kan man anvende transporten af et konservativt stof, der er fundet i en boring, og fraværet eller en forsinket ankomst af et reaktivt stof (fra samme kilde) til at estimere transporttiden og/eller omdannelseshastigheden.

4.8.8 Validering

Det er vanskeligt at validere en stoftransportmodel. Typisk vil man vælge en metodik, hvor man har kalibreret efter en delperiode og dernæst afprøver modellen på en anden delperiode. I mange tilfælde vil der dog ikke være tilstrækkelige data til både at kalibrere og validere med denne metodik. Grundet den lille datamængde kan det være en fordel at fokusere på, hvad der er vigtigt i den pågældende modelopgave. Er det for eksempel det højeste beregnede koncentrationsniveau, eller er det for eksempel hvor lang tid stoffet er om at blive skyllet ud af systemet?

Det er vigtigt at validere kildebeskrivelsen. Ved en punktkilde vil specielt diskretiseringen spille meget ind. En punktkilde vil typisk blive beskrevet som enten en frigivelse af en given mængde stof eller ved et specificeret koncentrationsniveau i et antal beregningsceller. Ved frigivelse af et stof vil det som minimum blive opblandet i den beregningscelle hvor stoffet introduceres. I det tilfælde vil der ske en momentan fortynding og modellen vil dels estimere en for hurtig transport og dels en for stor fortynding nær ved punktkilden.

Dette problem kan kun minimeres ved en finere diskretisering ved punktkilden.

Ved den efterfølgende transport er det også vigtigt at undersøge i hvilke lag den primære stoftransport foregår. Typisk vil geologiske formationer have højere porevandshastigheder i horisontalt end vertikalt. Dette vil fremme en vertikal lagdeling af stoftransporten. Det er derfor vigtigt ved rapportering af nøje gennemtænke for hvilke lag beregningsresultaterne skal præsenteres, samt hvorvidt den observerede lagdeling og relaterede stoftransporten nu også er konceptuel rigtig.

4.8.9 Usikkerhedsvurdering

En samlet usikkerhedsvurdering skal ud over at indeholde en vurdering af de transportspecifikke parametre (samt eventuelt de reaktive parametre) også indeholde en vurdering af grundvandsstrømningen. At lave en stringent metodik til usikkerhedsvurdering er derfor stort set umuligt, men som et minimum bør følgende elementer være diskuteret og kvantificeret:

- a) Usikkerhed på grundvandsstrømningen, herunder specielt gradienter - altså strømningshastigheder og -retninger
- b) Usikkerhed på parameteriseringen,
- c) Usikkerhed på initialværdier og kildestyrker

4.8.10 Simuleringsscenarier

Afhængigt af formålet vil man gennemføre forskellige scenarieberegninger. Dette kunne være beregninger af,

- hvor meget man kan pumpe i en indvindingsboring uden af få introduceret forureningskomponenter,
- hvor stort et koncentrationsniveau man kan forvente et specifikt sted i grundvandsmagasinet,
- hvor lang tid man skal afværgepumpe
- eller andet.

Ved udformningen af disse scenarier arbejdes der traditionelt med et "worst - case" scenarium. Dette worst -case scenarium vil dog afhænge af, hvad man mener, der udgør det største problem. Hvis der ønskes analyseret på flere parametre (eksempelvis maksimal koncentration, hvor lang tid man skal pumpe, eller hvor tidligt forureningskomponenterne ankommer), er det nødvendigt at lave individuelle scenarier til specifikt at belyse den enkelte parameter. I det omfang det er muligt, tilrådes det at lave en række scenarier, der indeholder den statistiske variation af de mest betydende parametre og så rapportere sandsynligheden for, at dette eller hint sker eller ikke sker. Denne proces er det muligt at automatisere for mange koder, og det syntes derfor ikke urimeligt at forlange en sådan analyse.

4.8.11 Rapportering

Der er i princippet to muligheder for at rapportere. Enten a) at sammenbygge rapporteringen eller b) at lave en separat rapportering af transportmodelleringen. En sammenbygget rapportering er at foretrække. Af den ovenstående gennemgang fremgår det, at stoftransportmodellering vil

spille stærkt ind på håndteringen af de enkelte elementer i grundvandsmodelleringen. Det kan dog være en fordel at opsplitte de enkelte komponenter således, at det klart fremgår, hvad der er genereret af transportmodelleringen, og hvad der er genereret af grundvandsmodelleringen. En sammenbygning vil også muliggøre en bedre diskussion af, hvordan de enkelte elementer er afstemt. Eksempelvis vil transportmodelleringen stille store krav til diskretiseringen. Dette kan medføre, at beregningerne udføres i forskellige skala og med inddragelsen af submodeller. Dette er måske ikke nødvendigt ud fra en strømningsbetragtning, og det ville derfor føles kunstigt, hvis der først blev argumenteret herfor i et senere afsnit. Ligeledes kan kalibreringen af grundvandsmodellen forbedres ved inddragelse af transportmodelleringer, hvorfor der også her bør foretages en samlet rapportering.

Rapporteringen af den konceptuelle reaktive model og eventuelle generiske kørsler for at identificere forskellige egenskaber bør foregå separat. Her er det vigtigt at den valgte konceptuelle model forklares detaljeret med specielt fokus på hvor procesformuleringen stammer fra og hvordan parameteriseringen er foregået.

4.8.12 Postaudit

Postaudit kan som ved grundvandsmodellering gennemføres. Der ikke er specielle forhold, der gør sig gældende ved stoftransportmodellering.

5 Litteratur

- Aller, L.T., Bennet, T., Lehr, J.H., and Petty, R.J. (1987) DRASTIC: A Standardized System for Evaluating Ground Water Pollution Potential Using Hydrogeologic Settings, U.S. EPA Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, EPA/600/287/035, Ada, OK.
- Anderson, M.P. and Woessner, W.W. (1992) The role of postaudit in model validation. *Advances in Water Resources*, 15, 167-173.
- Anderson, M.P. and Woessner, W.W. (1992) Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport, Academic Press, Inc., New York, NY, 1992.
- American Standards and Testing Materials (ASTM): www.astm.org
- Brown, D.M. (1992): The Fidelity Fallacy, *Ground Water*, Vol. 30, No. 4, 1992.
- Brun, A. (2000a) Fra hydrogeologisk tolkningsmodel til numerisk grundvandsmodel. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering. GEUS, 2000. Kapitel 5 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Brun, A. (2000b) Fastlæggelse af randbetingelser. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering. GEUS, 2000. Kapitel 6 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Brun, A. (2000c) Diskretisering af modelområdet i tid og sted. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering. GEUS, 2000. Kapitel 7 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Brun, A. (2000d) Initialbetingelser. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering. GEUS, 2000. Kapitel 9 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Carcel, R.F., Parrish, R.S., Jones, R.L., Hansen, J.L. and Lamb, R.L. (1988) Characterizing the Uncertainty of Pesticide Leaching in Agricultural Soils, *Journal of Contaminant Hydrology* 2, 1988, pp. 111-124.
- Carrera, J. (1990) A modelling approach incorporating quantitative uncertainty estimates. *Memoires of the 22nd Congress of IAHR. Lausanne*, Vol. XXII, pp. 67-78.
- Carrera, J. (1988) State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute transport equations. Groundwater flow and quality modelling. *NATO ASI Series C*, Vol. 224, Reidel, pp. 549-583.
- DGU (1995) Overførsel af modeldata til modeldatabase. Vejledning og kvalitetsdokumentation. Udarbejdet af Københavns Kommune, Frederiksberg Kommune, Københavns Amt og Cowi. DGU Datadokumentation nr 8, 1995.
- Doherty, J. (1994) PEST. *Watermark Computing*, Corinda, Australia, 122 pp.
- Forkel, C. (1996) Das numerische Modell - ein schmaler Grat zwischen vertrauenswürdigem Werkzeug und gefährlichem Spielzeug. Presented at the 26. IWASA, RWTH Aachen, 4-5 January 1996.
- Gravesen, P. (2000f) Opstilling af geologisk model. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A.

- og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 3 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Hearne, G.A., Wireman, M., Campbell, A., Turner, S. and 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 (2000a) Rapportering af model og resultater. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 14 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Henriksen, H.J. (2000b) Formålet med opstilling af model. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 2 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Henriksen, H.J. (2000c) Modelprogrammer på markedet. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 16 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Henriksen, H.J. (2000d) Anvendelse af modellen: Vandbalance, grundvandsdannelse og indvindingsoplande. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 13 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Henriksen, H.J. (2000e) Vedligeholdelse, opdatering, udbygning af modeller. Forfining af model. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 15 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Henriksen, H.J. (1997) Standard for kvalitetsdokumentation for anvendelse af grundvandsmodeller. ATV møde "Kalibrering, validering og usikkerheder på grundvandsmodeller", Schæffergården 28.05.97. ATV Komiteen vedrørende Grundvandsforurening. 115-127.
- Hill, Mary C. (1998) "Methods and guidelines for effective model calibration". *U.S. Geological Survey. Water-Resources Investigation Report 98-4005*.
- Jensen, K.H (2000) Matematik og numerisk grundlag for grundvandsmodellering. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 1 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Keefer, D.A. (1995) Potential for Agricultural Chemical Contamination of Aquifers in Illinois: 1995 Revision, Illinois State Geological Survey, *Environmental Geology* 148.
- Konikow, L.F. and Bredehoeft, J.D. (1992) Ground-water models cannot be validated. *Advances in Water Resources*, 15, 75-83.
- Lerner, D.N., Issar, A.S. McDonald, J.M. and Harbaugh, A.W. (1988) A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model, *Techniques of Water Resources Investigations of the U.S. Geological Surveys*, Book 6.
- Middlemis, H. (2000) Murray-Darling Basin Commission. Draft groundwater flow modelling guideline. July 2000. Aquaterra Consulting Pty Ltd., South Perth. Western Australia. Project no. 125.
- Miljøstyrelsen (1996) Kemiske stoffers opførsel i jord og grundvand: Bind 1, Projekt om Jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, No.20

- Miljøstyrelsen (1996) Miljøprojekt No. 467 Restprodukters påvirkning af grund- og indvindingsvand
- Murray-Darling Basin Commission (1997) Role of Computer Modelling in the Development and Implementation of Land and Water Management Plans for Irrigated Catchments. Natural Resources Management Strategy. Drainage Program. Technical Report no. 5. May 1997.
- National Research Council (1990) Ground Water Models: Scientific and Regulatory Applications, *National Academy Press*, Washington, DC, 1990.
- National Research Council (1993) Groundwater Vulnerability Assessment, Predicting Relative Contamination Potential under Conditions of Uncertainty, National Academy Press, Washington DC
- Oreskes, N., Shrader-Frechette, K. and Belitz, K. (1994) Verification, validation and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science*, 264, 641-646
- Poeter, Eileen P. and Mary C. Hill (1997): Inverse Models: A Necessary Next Step in Ground-Water Modeling. *Ground Water*, 35(2), 250-260.
- Poeter, Eileen P. and Mary C. Hill (1998): Documentation of UCODE, A computer Code for Universal Inverse Modelling. U.S. Geological Survey. Water-Resources Investigation Report 98-4080.
- Refsgaard, A. (2000) Processering af tidsseriedata. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 8 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Refsgaard, J.C. (2000b) Validering og følsomhedsanalyse. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 11 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Refsgaard, J.C. (1996) Terminology, modelling protocol and classification of hydrological model codes. In: *Abbott, M.B. and Refsgaard, J.C. (Eds): Distributed Hydrological Modelling*, 17-39, Kluwer Academic Publishers.
- Refsgaard, J.C. and 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.
- Refsgaard, J.C. og Henriksen, H.J. (2000a) Praktiske aspekter i forbindelse med modelopgaver. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 17 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Refsgaard, J.C. og Henriksen, H.J. (2000b) Opstilling af hydrogeologiske tolkningsmodel. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 4 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Rijkswaterstaat (2000) Handbook Good Modelling Practice.
- Ritchey, J.D. and Rumbaugh, J.O. (eds.) (1996) Subsurface fluid flow (groundwater and vadose zone) modeling. ASTM Special Technical Publication 1288.
- Rumbaugh, J. (2000) Personlig kommunikation (Washington - september, 2000).
- Sonnenborg, T. (2000a) Modelkalibrering. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 10 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).

- Sonnenborg, T. (2000b) Modellens repræsentativitet. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Kapitel 12 (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Sonnenborg, T. (2000c) Invers kalibrering for DK-model Sønderjylland. Fra: Henriksen, H.J., Refsgaard, J.C., Brun, A., Sonnenborg, T., Jensen, K.H., Refsgaard, A. og Gravesen, P. Ståbi i grundvandsmodellering,. GEUS, 2000. Appendix B (www.vandmodel.dk/staabi_2000.htm).
- Spitz, K. and Moreno, J. (1996) A practical guide to groundwater and solute transport modelling. John Wiley & Sons, INC.
- 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.
- State of California (1990): Scientific and Technical Standards for Hazardous Waste Sites, Volume 2: Exposure Assessment, Chapter 4, "Standards for Mathematical Modeling of Ground Water Flow and Contaminant Transport at Harzadous Waste Sites". State of California, Toxic Substances Control Program, DRAFT Standards, August 1990.
- State of Michigan (2000): Groundwater Modeling Program. Overview. http://www.deq.state.mi.us/lwm/water_mgmt/gwater/gwater.html . State of Michigan, Department of Environmental Quality (DEQ).
- U.S. Environmental Protection Agency (1987) Selection Criteria for Mathematical Models Used in Exposure Assessments: Ground-Water Models, EPA/600/8-88/075
- U.S. Environmental Protection Agency (1993) Ground Water Resource Assessment, U.S. EPA Office of Ground Water and Drinking Water, EPA, 813-E-93-003
- van der Heidje, P.K.M. (1987) Quality Assurance in Computer Simulations of Ground Water Contamination, EPA/600/J-87/084, PB-0124524
- van der Heidje, P.K.M (1994) Identification and Compilation of Unsaturated/Vadouse Zone Models, Environmental Protection Agency EPA/600/R-94/028
- van der Heidje, P.K.M (1996) Compilation of Saturated and Unsaturated Zone Modeling Software. Update of EPA/600/R-93/118, EPA/600/R-96/009
- van der Heidje, P.K.M and Elnawawy, O.A. (1993) Compilation of Ground-Water Models, EPA/600/R-93/118
- Waveren, R.H. van, Groot, S., Scholten, H., van Geer, F.C., Wösten, J.H.M., Koeze, R.D. og Noort, J.J. (1999) Good Modelling Practice Handbook. Stowa Report 99-05. Dutch Department of Public Works. Institute for Land and Water Management and Waste Water Treatment. ISBN 90-5773-056-1. <http://waterland.net/riza/aquest>
- Zheng, C. and Bennett, G.D. Applied contaminant transport modelling - Theory and practice.

Appendix A: Kvantitative kalibreringskriterier

Kvantitative kalibreringskriterier (Sonnenborg, 2000a) baseres hyppigt på et mål for den gennemsnitlige afvigelse mellem observeret og simuleret værdi, også benævnt en norm. Nedenfor er angivet fire normer, som vægter de enkelte residualer på forskellig måde. *ME* (mean error eller middelfejl) udtrykker den gennemsnitlige afvigelse mellem observeret y_{obs} og simuleret y_{sim} tilstandsvariabel

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

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

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_{obs,i} - y_{sim,i}|$$

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

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

Denne norm beregner standardafvigelsen på residualerne, og kan sammenlignes direkte 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

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

hvor w_i er vægtningen 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 ($w_i = 1/s_i^2$), vil denne norm 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. Den sidste norm, der gengives her, er R^2

$$R^2 = \frac{\sum (y_{obs,i} - \bar{y}_{obs})^2 - \sum (y_{obs,i} - y_{sim,i})^2}{\sum (y_{obs,i} - \bar{y}_{obs})^2}$$

hvor \bar{y}_{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.

Appendix B: Erfaringer fra udlandet

Fra udlandet er der en række væsentlige erfaringskilder fra bl.a. USA, England, Australien og Holland som skal nævnes.

Fra USA er der dels de såkaldte ASTM standarder, dels retningslinier udarbejdet på baggrund af United States Geological Survey's (USGS) erfaringer med såvel kodeudvikling som modelprojekter, og endelig erfaringer formidlet til fagfolk på internationale konferencer og workshops (f.eks. på det teoretiske område "ModelCare" konferencer bl.a. i 1996 og 1998 og på det mere praktiske niveau MODFLOW konferencer i 1999) i de seneste år har rettet særlig fokus på spørgsmål såsom kalibrering, troværdighed, parameterfastsættelse og usikkerheder forbundet med numeriske grundvandsmodeller. US. Army Corps of Engineering har desuden retningslinier omkring modellering fra midten og slutningen af 90'erne.

En række amerikanske stater har udarbejdet egne retningslinier (bl.a. Michigan, California, Alaska, Kansas mm.). Endelig foreligger der et sæt artikler fra en konference afholdt i 1996 i Denver, Colorado der beskriver forskellige trin i modellerings processen: konceptualisering, valg af kode, modelopsætning, kalibrering, verifikation, usikkerhed og post-audit (Ritchey og Rumbaugh, 1996). I de seneste 5 år har der som følge af manglende finansiering fra US-EPA ikke været publiceret nye ASTM retningslinier på modelområdet. Der arbejdes på nye retningslinier for stoftransportmodellering, men disse forventes ikke publiceret indenfor de næste par år (Rumbaugh, 2000).

Metoder og retningslinier for effektiv modelkalibrering foreligger fra USGS (Hill, 1998). Rapporten beskriver 14 retningslinier designet med henblik på modelopsætning og kalibrering af komplekse modeller ved anvendelse af invers modellering (automatisk kalibrering). Særlig fokus er i rapporten lagt på problemer med instabilitet og "non-unikness" (problemer med entydighed), og på brugen af avancerede statistiske mål. Rapporten er primært tilegnet erfarne modellører.

Fra England er der NRA retningslinier fra 1995 omkring afgrænsning af beskyttelseszoner ved brug af partikelbane modeller: Guide to Groundwater Protection Zones in England & Wales (NRA, 1995). Formålet med dette paradigme var at opnå en ensartet struktur for konsulenternes modelrapportering, således at NRA ud fra rapporten og vedlagte datasæt kunne forstå og gentage kalibreringen af modellerne, samt forestå udpegningen af grundvandsbeskyttelseszoner. NRA forlangte at modellen FLOWPATH (Waterloo Hydrologic Software) anvendtes til beregningerne (en 2D strømningssmodel). Der var i NRA's retningslinier lagt vægt på aftalte kalibreringsmål, journal over kalibreringssimuleringer og usikkerhedsanalyse med vurdering af usikkerheder på de bedste parameterbestemmelser, herunder vedtagne intervaller for infiltration og hydraulisk ledningsevne, som benyttes i usikkerhedsanalysen. Specifikke anbefalinger til ekstra datakrav samt yderligere simuleringer skal identificeres med en klar indikation af prioriteringen af disse ekstra tiltag. Principperne bag NRA retningslinier

gælder fortsat i UK, men i dag anvendes i højere grad 3D grundvandsmodeller (f.eks. MODFLOW).

Der er nye retningslinier på vej i for England og Wales omkring *Model Procedures for the Management of Contaminated Land (CRL11)*. Endelig er der *Strategic Review of Groundwater Modelling* under udarbejdelse med fokus på rammer for opstilling af konceptuelle og numeriske modeller for grundvandsressourcen (EA). Også omkring "beslutnings støttesystemer" er der nye retningslinier på vej: *Technical Guidance on Assigning Values to Uncertain Parameters in Subsurface Contaminant Fate & Transport Modelling* og *Guide to good Practice for the Development of Conceptual Models and the Selection and Application of Mathematical Models of Contaminant Fate & Transport Processes in the Subsurface*. De nye retningslinier forventes publiceret ultimo 2000.

Fra Australien foreligger der udkast til retningslinier for Murray-Darling Basin Commission *Draft Modelling Guidelines* (Middlemis, 2000). Der har tidligere været afholdt en workshop i 1997 af Murray-Darling Basin Commission som omfattede andre typer modeller end grundvandsmodeller. En række bekymringer blev her beskrevet bl.a. en mangel på almindelig forståelse mellem modellører og rekvirenter. Proceedings fra denne workshop konkluderede at, da alle modeller indeholder eller kan indebære fejl i simuleringerne, så er en streng overvågning med hensyn til validering og forståelse af resultater af vital betydning (Murray-Darling Basin Commission, 1997). I det opfølgende arbejde (Middlemis, 2000) vurderes det at modeller er nødvendige (man kan ikke i det uendelige indsamle nye data, og beslutninger kan ikke fortsat udsættes). Det påpeges, at følsomhedsanalyser og usikkerhedsvurderinger bør spille en væsentlig rolle med hensyn til at reducere usikkerhederne forbundet med de beslutninger der skal tages på grundlag af modelstudier (Middlemis, 2000). En definition på bæredygtig udnyttelig vandressource findes i (Kalaitzis et al., 1999): "*Den udnyttelige vandressource er den del af gennemsnitlige grundvandsdannelse (over en lang periode), som kan oppumpes hvert år, uden at påføre uacceptable påvirkninger på "grundvandsbrugerne" eller miljøet*".

Fra Holland foreligger der nye retningslinier (Waveren et al., 1999). Disse retningslinier er en del af en standard for alle typer modeller (grundvand, overfladevand, etc.) som forskellige hollandske myndigheder følger. De parter der deltager i den fortsatte udvikling af disse retningslinier er bl.a. Rijkswaterstaat, STOWA, DLO Staring Centrum, Agricultural University of Wageningen, NITG-TNO og Delft Hydraulic Water Laboratory. Et spektrum af indgangsvinkler er beskrevet lige fra den felt data orienterede til den proces orienterede (numeriske modeller /deterministiske modeller). De proces orienterede modeller svarer til spektret dækket af screenings-, overslagsberegninger til akvifer simuleringer/modeller (Hi Fi), omtalt i denne rapport. Den hollandske håndbog har primært til formål at supportere modellører (specielt begyndere og end-users), er formentlig af begrænset værdi med henblik på udvikling af retningslinier for opstilling af modeller.

Desuden kan fremhæves en række gode "bøger" om emnet:

- Andersson M.P. and Woessner W.W. (1992): *Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport*. Academic Press. San Diego, 381 pp.

- Spitz K. and Moreno (1996): A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modeling. Wiley. New York, 461 pp.
- Zheng, C. and Bennett G.D. (1995): Applied Contaminant Transport Modelling. Van Nostrand Reinhold, New York, 440 pp.

B.1 ASTM retningslinier

American Society for Testing and Materials (ASTM) blev grundlagt i 1898 og er en af de største frivillige organisationer til udvikling af standarder i verden. ASTM udvikler standard test metoder, specifikationer, praksis, retningslinier, klassifikationer og terminologi på 130 forskellige områder for bl.a. metal, maling, plastik, tekstiler, olie, bygning, energi, miljø, forbrugsprodukter, medicinområdet og udstyr, computersystemer, elektronik og mange andre områder.

En ASTM standard er et dokument som er udviklet på basis af fuld konsensus i den tekniske komité som ansvaret for det pågældende område (der er i alt 129 forskellige tekniske komitéer). De tekniske komitéer er under inddelt i subkomitéer og arbejdsgrupper, der fokuserer på bestemte områder. Standarder kan købes fra ASTM's hjemmeside: www.astm.org og koster typisk omkring 25 \$ pr. standard.

Når det gælder retningslinier for grundvandsmodeller er det primært ASTM komité D18 "Soil and rock" som er relevant. D18 blev dannet i 1937. Komiteen har ca. 1000 medlemmer og har ansvaret for 250 standarder indenfor de geotekniske og geomiljømæssige områder. Med særlig relevans i forbindelse med grundvandsmodellering hører standarder udarbejdet af subkomité/arbejdsgruppe D18.21 "Groundwater and Vadose Zone Investigations" bl.a. følgende 13 standard guides:

- D5447-93e1 Standard Guide for Application of a Ground-Water Flow Model to a Site-Specific Problem
- D5490-93e1 Standard Guide for Comparing Ground-Water Flow Model Simulations to Site-Specific Information
- D5609-94e1 Standard Guide for Defining Boundary Conditions in Ground-Water Flow Modeling
- D5610-94e1 Standard Guide for Defining Initial Conditions in Ground-Water Flow Modeling
- D5611-94e1 Standard Guide for Conducting a Sensitivity Analysis for a Ground-Water Flow Model Application
- D5718-95e1 Standard Guide for Documenting a Ground-Water Flow Model Application
- D5880-95e1 Standard Guide for Subsurface Flow and Transport Modeling
- D5979-96e1 Standard Guide for Conceptualization and Characterization of Ground-Water Systems
- D5981-96e1 Standard Guide for Calibrating a Ground-Water Flow Model Application
- D6025-96e1 Standard Guide for Developing and Evaluating Ground-Water Modeling Codes
- D6033-96e1 Standard Guide for Describing the Functionality of a Ground-Water Modeling Code
- D6171-97e1 Standard Guide for Documenting a Ground-Water Modeling Code
- D6030-96 Standard Guide for Selection of Methods for Assessing Ground Water or Aquifer Sensitivity and Vulnerability
- D6170-97e1 Standard Guide for Selecting a Ground-Water Modeling Code

B.2 USGS, US Army Corps of Engineering og enkelte staters retningslinier

Fra USGS foreligger en række tekniske noter, som har relevans i forbindelse med projekter der involverer anvendelse af numeriske grundvandsmodeller, www reference: <http://water.usgs.gov/admin/memo/GW/auto.html>

- Guidance for project activities involved with delineation of wellhead-protection areas and aquifer vulnerability (gw. 00.01)
- Programs and plans – update of the National Policy to Archive Ground Water Flow and Transport models (gw. 00.02))
- Policy for the documentation of non-U.S. Geological Survey computer programs used for analysis in groundwater projects (gw.91.04)
- Clarification of policy for using non-U.S. Geological Survey computer programs in groundwater projects (gw.97.01)
- Publications – Policy on documenting the use of groundwater simulation in project reports (gw.96.04)
- USGS retningslinier for modelkalibrering ved hjælp af invers modellering (Hill, 1998; Poeter and Hill, 1998)

Paradigma for modelrapportering (gw.96.04) blev lanceret med henblik på en opdatering af et paradigma fra november 1975, som ikke ansås tidssvarende længere på grund af ændringer i modelleringsteknik, og hyppigheden af problemer som konstateres ved review af modelrapporter, således at en fornyet gennemgang af politik på området var formålstjenligt. Paradigmaet fra USGS anbefalede 10 punkter som skulle være indeholdt i en modelrapport og beskrives:

1. formålet med undersøgelsen og den rolle simuleringerne spiller med hensyn hertil
2. det hydrologiske system som undersøges
3. matematiske metoder der benyttes og deres egnethed i forhold til problemet der løses
4. anvendte randbetingelsers hydrologiske karakter
5. retfærdiggør det diskretiserede netværk (finite differens eller finite element)
6. grundvandsmagasinsystemet der modelleres
7. påvirkninger af vandbalancen såsom oppumpning, evapotranspiration, grundvandsdannelse, vandstandsændringer i vandløb, lækage fra øvrige grundvandsmagasiner og kildestyrke (ved stoftransportmodeller)
8. startværdier som benyttes i simuleringen (transiente simuleringer)
9. kalibreringskriterierne, proceduren for kalibreringen samt resultaterne
10. begrænsninger af modellens repræsentativitet for det aktuelle system og betydningen på resultaterne og konklusionerne præsenteret i rapporten

En del amerikanske stater har selv opstillet retningslinier for grundvandsmodellering bl.a. kan nævnes:

- Scientific and Technical Standards for Hazardous Waste Sites, Volume 2: Exposure Assessment, Chapter 4, "Standards for Mathematical Modeling of Ground Water Flow and Contaminant Transport at Hazardous Waste Sites". State of California (1990)
- State of Michigan, Land and Water Management Hydrologic Studies Unit: Criteria for Groundwater Modeling Reports (State of Michigan, 2000)
- Alaska Department of Environmental Conservation. Division of Spill Prevention and Response Contaminated Sites Remediation Program: Guidance for fate and transport modeling (1998)

- Kansas Bureau of Environmental Remediation: Minimum standards for model use. Remedial section guideline (1993).

De fleste af de statslige retningslinier er mere eller mindre kopier af ASTM og USGS retningslinier når det gælder strømningsmodeller. På stoftransport området indeholder visse statslige retningslinier dog et element af acceptkriterier for stoftransportmodeller og metoder til vurdering af nøjagtighed (f.eks. State of California). Andre er meget korte og har nærmest karakter af tjeklister. Retningslinier fra State of Michigan kan hjemtages fra internettet.

B.3 Erfaringer fra internationale workshops og konferencer

B.3.1 ModelCare konferencen i 1999

ModelCare konferencerne, der afholdes ca. hvert 3. år, har til formål at diskutere aspekter indenfor kalibrering og troværdighed af grundvandsmodellering. I 1999 var der især fokus på modelusikkerhed, som var hovedoverskriften for konferencen. Temaerne for konferencen, der afspejler problemområder indenfor modellering, var: a) modellerings koncepter, b) stokastisk modellering, c) parameter estimering og modelkalibrering, d) troværdighed af modelforudsigelser e) omfattende udnyttelse af feltinformationer og f) ikke lineær og koblet strømning og transport modellering. I det følgende gives på baggrund af bidragene til konferencen en kort oversigt over, i hvilken retning der arbejdes internationalt for at mindske og kvantificere modelusikkerhed. Bidragene kan findes i: Calibration and reliability in groundwater modelling: Coping with uncertainty, (edited by F. Stauffer, W. Kinzelbach, K. Kovar and E. Hohn), IAHS Publication no. 265.

- Under a) diskuteredes hvordan processer som f.eks. sprækkestrømning og clogging kan medtages i modellerne. Resultater, viser at disse processer kan have stor betydning for forudsigelse af transport.
- Beskrivelse af heterogeniteter i hydraulisk ledningsevne og dispersion har også vist at have afgørende betydning for modellers evne til at forudsige transport. Tendensen er at prøve at beskrive disse heterogeniteter vha. stokastiske metoder. Dette er der flere eksempler på under b).
- Den optimale modelkalibrering og parameter bestemmelse har været efterspurgt i mange år. Til løsning af dette er inverse metoder blevet udviklet i hastig fart. Eksempler på både udvikling og applikation af koder er vist under c), hvor også et eksempel på retningslinier for kalibrering er vist.
- Troværdighed af modelforudsigelser er naturligvis af afgørende betydning, når modellering danner grundlaget for beslutninger angående f.eks. grundvandsbeskyttelse. Under d) præsenteres især Monte Carlo metoder til vurdering af usikkerhed på modelforudsigelser.
- Et godt datagrundlag er altafgørende for opnåelse af sikre modelforudsigelser. Det har vist sig at inddragelse af mange typer data kan hjælpe for forståelsen af grundvandssystemet. Eksempler på benyttelse af forskellige datatyper er vist under e) f.eks. seismiske data, radon-222 og remote sensing data.

- Der er stadig mange udfordringer i at få beskrevet ikke-lineær strømning og transport korrekt. Der er især fokus på densitetsmodellering, multi-fasemodellering og reaktiv modellering, som alle blev vist under f). Kobling mellem overfladevand og grundvand er vigtig, når vandets kredsløb skal beskrives. Der arbejdes derfor på kobling på modelbasis, hvor et eksempel på en kode præsenteres under f).

B.3.2 MODFLOW konferencen i 1998

Der er gennem de seneste år afholdt adskillige internationale konferencer og workshops med hovedvægten på grundvandsmodellering.

Konferencen MODFLOW'98 blev afholdt i oktober 1998 i Golden, Colorado, USA. Der deltog omkring 250 forskere, konsulenter, 'water management' personer og modelkode udviklere i konferencen.

Det var den første af en sandsynligvis længere række af MODFLOW konferencer arrangeret af bl.a. IGWMC (International Ground Water Modeling Center - <http://www.mines.edu/research/igwmc/>) og USGS (U.S. Geological Survey - <http://www.usgs.gov/>). Næste konference, MODFLOW 2001, afholdes i september 2001.

Det mest centrale emne på MODFLOW'98 konferencen omhandlede kalibrering og parameterestimering.

Der er en hastigt stigende anvendelse af forskellige metoder til automatisk kalibrering af grundvandsmodeller (invers modellering). Fordelene ved den automatiske kalibrering og parameterestimering er (1) at den er mindre subjektiv end den manuelle kalibrering ('trial-and-error'), (2) giver mulighed for en statistisk behandling af de estimerede parametre, og (3) kan være tidsbesparende.

Konferencens hovedtaler, Mary C. Hill (USGS) rejste spørgsmålet om grundvandsmodeller er præcise nok til at være brugbare, og understregede vigtigheden af at designe en grundvandsmodel så den kan bruges til at teste hypoteser om det aktuelle grundvandssystem mod tilgængelige observationer af modelberegnete størrelser, f.eks. målte grundvandspotentiale målinger og vandløbsafstrømninger (se f.eks. M.C. Hill: Methods And Guidelines For Effective Model Calibration. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 98-4005 (http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GW_Subsurf/mchill/pubs/method/index.shtml)).

På konferencen blev en lang række problemstillinger omkring brugen af MODFLOW-modellen og grundvandsmodellering generelt præsenteret og diskuteret.

Det drejede sig bl.a. om stoftransportmodellering og oprensning, GIS og brugerflader, kobling med overfladevandsmodeller, begrænsninger og usikkerhedsvurderinger ved modellering. Konferencens omdrejningspunkt er selvfølgelig MODFLOW-model koden (<http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow.html>), men anvendelsen af andre modeller og nyudviklede applikationer udgjorde også en væsentlig del af konferencen.

Appendix C: Gruppering af udenlandske erfaringer efter milepæle i modelleringsprocessen

C.1 Opstilling af konceptuel model

ASTM standarderne publiceret i perioden 1993-97 (startende med D5457-93) er baseret på litteratur og forskningsresultater fra omkring 1990, som har fokus på strømningsmodellering og forureningstransport i grundvand: NRC (1990), State of California (1990), van der Heijde (1987), USEPA (1987) og Andersson and Woessner (1992). Den danske terminologi svarer meget godt til ASTM standardernes (idet den til en vis grad bygger på den samme litteratur).

ASTM D5447-93 præsenterer modelleringsprocessen, inkl. den feedback som er forbundet med en iterativ modelleringsmetodik præsenteret af Andersson og Woessner (1992). Der lægges vægt på definition af formål med modelleringen og udvikling af en egnet konceptuel model. Der er også en beskrivelse af det relevante indhold i en modelrapport. Mest interessant ved D5457-93 er måske dens tidstypiske "aftryk", idet trin 6 i modelprotokollen (fastlæggelse af nøjagtighedskriterier) ikke nævnt eksplicit i denne standard fra 1993. Ligeledes er trin 9 (usikkerhedsanalyser) heller ikke nærmere beskrevet. De øvrige 10 punkter i protokollen er dog relativt udførligt beskrevet. Netop nøjagtighedskriterier, troværdighed, usikkerhed mm. er emner der først fra midten af 90'erne har fået mere fokus i forbindelse med grundvandsmodellering.

ASTM D5880-95 er en introduktionsguide til strømnings- og stoftransportmodellering. Guiden beskriver en vifte af modelstudier og terminologi, og giver en bred indføring i en generel modelleringsproces, numeriske metoder, fejltyper og krav til dokumentation. Guiden definerer begrebet "model fidelity" (på dansk model fidelitet), som er lånt fra det lyd-elektroniske område. Modelfidelitet defineres den grad til hvilken en modelopsætning afspejler, eller designes til at afspejle det fysiske hydrogeologiske system (Ritchey og Rumbaugh, 1996) – med andre ord, graden af hvilken en modelopsætning designes til at være realistisk. Der arbejdes med 3 forskellige modelklassifikationer: screening, overslagsberegning og akvifer simulering. Screening modeller er de mindst repræsentative af det fysiske system (low fidelity), og kalibreres sjældent i forhold til overvågningsdata. De kan anvendes til foreløbige kvantitative vurderinger (grove beregninger), som input til dataindsamling etc. Overslagsberegninger (på engelsk benyttes termen: ingeniørmæssige beregninger) designes med henblik på at simulere responsen på et hydrogeologisk system som følge af ændringer i de hydrologiske påvirkninger, magasin parametre er randbetingelser. De behøver ikke altid forudsætte en høj grad af overensstemmelse med simuleringer og det hydrogeologiske system, idet de aspekter af modellen som er urealistiske (eller for hvilke der ikke er data) kan designes så de er konservative (det kan f.eks. antages at en ukendt

parameter eller påvirkning antager en øvre eller nedre grænseværdi af en realistisk "range" eller interval). Akvifer simulering er high fidelity repræsentationer af det fysiske system, velegnet til simulering af responsen af et system i forhold til arbitrært forudsatte ændringer i de hydrogeologiske forhold. Akvifer simulering er den type værktøj som er påkrævet i forbindelse med en bæredygtig udnyttelse og forvaltning af vandressourcen, specielt hvor der er knaphed på denne.

Definition af formål omfatter præcisering af de specifikke formål med modelsimuleringerne. Denne definition bør indeholde en bestemmelse af det nødvendige analyseniveau (modelkompleksitet), krav til modellens troværdighed når det gælder simuleringernes nøjagtighed, samt vurdering af hvor følsomt det er for projektet, at modelsimuleringerne eventuelt giver ukorrekte eller usikre resultater (D6170-97). Typen af simuleringer der skal udføres med modellen skal fastlægges (D5718-95).

Specifikation af formål bør ideelt set foretages forud for igangsætning af øvrige modelaktiviteter (D5747-93). Modellen bør anvendes som et værktøj med henblik på at bidrage til løsning af et specifikt problem eller besvarelse af specifikke spørgsmål, i stedet for at være et slutmål i sig selv (gw96.04).

Grundvandsmodeller (strømning og stoftransport) kan generelt anvendes til en række formål: State of Michigan (00):

- Afgrænsning af grundvandsdannende oplande til vandværker eller grundvandsmagasiner
- Regionale grundvandsressource vurderinger
- Analyse af påvirkninger på grundvandets trykniveau som følge af vandindvindinger
- Vurdering af forureningsudbredelse i grundvand (inkl. dispersion og nedbrydning)
- Vurdering af effekter af forskellige typer afværgeanlæg (forsegling, pumpning mm.)
- Simulering af mulig udbredelse af forurenende stoffer i forbindelse med risikoanalyser

Den hydrogeologiske tolkningsmodel (konceptuelle model) er en fortolkning eller en arbejdshypotese for de fysiske systems karakteristika og dynamik inkl. (D5447-93):

- Geologisk og hydrologisk ramme
- Medietype (f.eks. porøs eller opsprækket)
- Fysiske og kemiske processer
- Hydrauliske egenskaber
- "Sources og sinks" til grundvandsdannelsen, herunder vandbalanceforhold (budget)

Disse forhold beskrives i tekst suppleret med illustrationer (f.eks. konturkort, tværprofiler eller blokdiagrammer).

Den *geologiske ramme* består af udbredelse og konfiguration af grundvandsmagasiner og lavpermeable lag. Tykkelse, sammenhæng, lithologi og geologiske struktur af de enkelte enheder som er relevante i forhold til de opstillede formål med modelarbejdet (jf. 4.1) skal beskrives. Magasinsystemet vil ofte udbrede sig udover det afgrænsede modelområde. Udover den detaljerede beskrivelse indenfor modelområdet, bør der som minimum indgå en generel beskrivelse udenfor området.

Den *hydrologiske ramme* består af den fysiske udbredelse af magasinsystemet, hydrologiske forhold der påvirker eller kontrollerer grundvandsstrømningssystemet, analyse af strømningsretninger, og medie type. Den konceptuelle model bør tage stilling til i hvilken grad magasinsystem mediet kan antages at opføre sig som et porøst medium. Såfremt magasinsystemet er væsentligt opsprækket, bør den konceptuelle model klargøre sådanne forhold. Hydrologisk ramme inkluderer ligeledes randbetingelser, som ikke nødvendigvis er fysiske, men kan ændre sig i tid, såsom grundvandsskel. Trykniveau observationer giver mulighed for vurdering af strømningsrater og -retninger. Derudover kalibreres grundvandsmodellen imod disse værdier. Trykniveau observationer bør tabelleres både rumligt og tidsligt. Analysen af strømningssystemet inkluderer vurdering af både vertikale og horisontale gradienter, afgrænsning af grundvandsskel og strømmlinier.

De *hydrauliske egenskaber* omfatter magasinsystemets vandførende- og magasineringsegenskaber. Specifikke eksempler inkluderer transmissivitet, hydraulisk ledningsevne, magasin-koefficient og frit magasin tal. Hydrauliske egenskaber kan være homogene eller heterogene indenfor modelområdet. Bestemte egenskaber, såsom hydraulisk ledningsevne, kan også have retningsbestemte egenskaber, dvs. anisotropi. Det er vigtigt at dokumentere felt- og laboratorie-målinger af disse forhold med henblik på at afgrænse en acceptable variationsramme som input til modelkalibreringen.

Sources og sinks af vand til grundvandsmagasinsystemet påvirker grundvandets strømningmønster. De mest almindelige eksempler er oppumpning eller injektion fra/i borer, infiltration, fordampning, dræn, lækage på tværs af lavpermeable lag og strømning til eller fra overfladevandssystemer. Beskrivelsen af disse forhold i den konceptuelle model omfatter rater og tidslig variation. Der bør opstilles en samlet vandbalance.

Som en del af modelarbejdet bør der gennemføres en analyse af svagheder i datagrundlaget og potentielle kilder til fejl i den konceptuelle model. Den konceptuelle model vil ofte indeholde delområder med usikkerheder som følge af mangel på feltdata. Disse områder identificeres og betydningen heraf vurderes i forhold til formålet med projektet. I tilfælde hvor systemet kan konceptualiseres på mere end en måde, bør alternative konceptuelle modeller beskrives og evalueres.

D5979-96 går i større detalje med den konceptuelle model. Denne guide indeholder en integreret metode til konceptualisering og karakterisering af grundvandssystemer:

- Problemformulering
- Databaseudvikling
- Foreløbig konceptualisering
- Overfladekarakterisering
- "Underjordisk" karakterisering
- Hydrogeologisk karakterisering
- Karakterisering af grundvandssystem
- Kvantificering af grundvandssystem

Udkastet til de australske retningslinier (Middlemis, 2000) indeholder en række retningslinier til opstilling af konceptuel model, bl.a.:

- præcis definition af modelstudie formål og modelfidelitet

- vælg et niveau for modelfidelitet som er højt nok til at tilgodese formålet, men lavt nok til at tillade "konservatisme" hvor det er nødvendigt
- opstil en konceptuel model som er konsistent med tilgængelig information og projektformål
- vurder problemet med manglende entydighed ved at indsamle data for de hydrauliske forhold fra multipelt forskellige hydrologiske forhold
- foretag peer reviews og fasthold effektiv kommunikation mellem alle involverede parter
- fastlæggelse af modelfidelitet (nøjagtighedskriterier) bør omfatte forhandlinger mellem rekvirent/slutbruger og modelteamet, inklusiv reviewer og relevante overordnede myndigheder
- tilgængelige rapporter indsamles og listes af projektlederen inkl. beskrivelse af systemkarakteristika; modelstudiet bør initieres med et litteraturstudium og dataanalyse med henblik på at opnå en forståelse af de vigtigste aspekter af det fysiske system, data pålidelighed, og de hydrologiske processer som kontrollerer påvirkninger af grundvandssystemet; analysen bør påpege datamangler som kan påvirke modelopstillingen og anbefale feltmålinger med indsamling af yderligere data; der bør afsættes de nødvendige ressourcer til denne fase; data bør sammenstilles i en database (eller som minimum i regneark) med henblik på modelopstilling og kalibrering
- rumlige koordinater og højdedata bør specificeres i konsistente enheder (i DK: UTM/kote m); som længdeenhed bør anvendes meter, volumenenhed m³, tidsenhed dage og trykniveau bør omregnes til ferskvandsdensitet ved 25 grader (sidstnævnte formentlig kun relevant for Australien)
- den konceptuelle model bør have tilstrækkelige frihedsgrader der tillader en bred vifte af prognosesimuleringer der bredt kan belyse kriterierne for acceptable/uacceptable påvirkninger
- den/de konceptuelle model(-er) skal dokumenteres i en modelstudieplan, reviews og revideres i takt med at databasen forøges

De hollandske retningslinier (Waveren et. al, 1999) nævner nogle problemstillinger i forbindelse med grundvandsmodeller for den mættede zone, som kræver særlig opmærksomhed:

- antagelser i forbindelse med den konceptuelle spiller en særlig vigtig rolle (bl.a. afgrænsning af modelområde både horisontalt og vertikalt); antagelser ændres normalt ikke i de efterfølgende faser af modelprocessen
- strukturering af lag i magasiner og lavpermeable lag i modelopsætningen har stor betydning for de simulerede strømningsveje og resultaterne af modelleringen
- normalt ses der bort fra småskala heterogeniteter (f.eks. tynde lavpermeable lag, sprækkesystemer, skiftende sand, grus og leraflejringer mm.) - viden om disse forhold normalt er begrænsede. Manglende erkendelse af betydningen af disse forhold kan medføre fejlagtige tolkninger af resultaterne i den efterfølgende modelleringsproces, specielt ved stoftransportmodellering. Neglicering af f.eks. densitetforholdenes betydning kan i kystnære områder eller omkring punktkilder kan føre til fejlbehæftede simuleringer af strømningsretninger og transport.

C.2 Valg af modelkode, modelopsætning og fastlæggelse af nøjagtighedskriterier

Valg af modelkode er et vigtigt trin i et modelprojekt, og forudsætter en omhyggelig vurdering af hvordan forskellige alternative modelkoder matcher de givne projektkrav. Der eksisterer mange forskellige modelkoder, som hver har specifikke styrker og funktionalitet men også begrænsninger.

Funktionaliteten af en modelkode kan beskrives som det sæt funktioner og faciliteter som en given kode kan tilbyde mht. beskrivelse af systemets geometri, de simulerede processer, grænsebetingelser og kodens analytiske og operationelle kapacitet (D6170-97).

Et givent modelprojekt indebære et bestemt sæt projektafhængige krav med hensyn til modelleringen. Derfor er det vigtigt at den bedst egnede kode vælges til brug i modelprojektet. Dette er specielt vigtigt i projekter hvor modelleringen er en omfattende opgave eller hvor de beslutninger der skal træffes på baggrund af bl.a. modelleringen er bekostelige.

En systematisk og grundig beskrivelse af projektkrav og egenskaber/potentiale i forskellige modelkoder udgør grundlaget for et effektivt kodevalg.

Der vil sjældent være et perfekt match mellem ønskede modelkode karakteristika eller udvælgelseskriterier og kapaciteten af tilgængelige koder. Udvalgte kriterierne foreslås i D6170-97 opdelt på essentielle og ikke-essentielle kriterier. Modelkoder der ikke opfylder de essentielle krav bør frasorteres fra kandidatlisten. Vigtigheden af en kodes opfyldelse af de ikke-essentielle kriterier bør vurderes f.eks. ved at tildele sådanne vægtfaktorer (dette er dog ret subjektivt).

Tilgængeligheden af eller kendskabet til en bestemt modelkode, kan føre til "modellerings overkill" i form af at man vælger en forud valgt kode, som forudsætter signifikant flere ressourcer til såvel dataindsamling og modelopsætning, end nødvendigt for et givent modelprojekt. En sådan modellerings overkill kan også være et resultat af brugerens manglende evne til at begrænse omfanget/antallet af essentielle kriterier en given kode bør opfylde.

Den opfattelse at brugen af den "bedste" eller mest matematisk avancerede modelkode automatisk vil resultere i troværdige modelsimuleringer eller nøjagtighed er et falsum. Den tekniske kapacitet af modelløren eller modellerings-teamet, som er involveret i modelprojektet, vil oftest have størst betydning for projektets resultater: Simmons and Cole (1985).

Hvis forskellige projektspørgsmål skal besvares, kan der være behov for anvendelse af mere end en enkelt kode. Dette er ofte tilfældet når modelkoder anvendes på forskellige trin i et projekt f.eks. screening, overslagsberegning og detailprojekt. Her nævner D6170 eksempelvis brug af model i forbindelse med et afværgeprojekt. På det tidlige trin i projektet kan modellen benyttes til problemformulering og conceptualisering af systemet. I design fasen benyttes modellen til en screening mellem forskellige alternative afværgeteknikker og til at detailprojektere den valgte approach for afværgeanlægget (tilsvarende forskellige trin er de også i detailkortlægning, zoner og arbejdet med indsatsplaner/sårbare zoner).

Såfremt der i forbindelse med kodeudvælgelses proceduren udvæges en kode, hvor det vurderes at der er behov for yderligere kodeudvikling, så skal der fastlægges en passende kvalitetssikring for denne kodeudvikling og test af den udviklede kode (se D6025-96 / afsnit 4.4).

Baseret på projektformål og konceptuel model (se afsnit 3) så bestemmes de relevante modelfunktioner og disse oversættes i et sæt informative, veldefinerede beskrivelser. D6025-96 indeholder en tjekliste som kan anvendes i dette trin (i alt 14 sider). Det kan nævnes at forhold såsom brugerflade, præprocesserings funktionalitet, postprocesserings funktionalitet, modeltype, primær modelanvendelse, parameterdiskretisering, rumlig orientering, "restart capability", diskretisering i rummet, mættet zone forhold, umættet zone forhold, tilstandsvariable, løsningsmetode, invers modellering/parameteridentifikation, output karakteristik, vandkvalitet, transport processer, randbetingelser og løsningsmetoder mm. for stoftransport fremgår af denne meget omfattende tjekliste.

Udkastet til de australske retningslinier (Middlemis, 2000) siger i relation til modelopsætning:

- valg af kode bør foretages af modellør; der bør vælges en kode der er egnet til det konkrete studie og en passende argumentation for valget bør dokumenteres i modelstudieplanen
- modelstudieplan skal færdiggøres og reviews ved afslutningen af konceptualiseringsfasen indeholdende: formål, fidelitet (nøjagtighedskrav) og påkrævede ressourcer med henblik på at fuldende modelstudiet, den første hydrogeologiske tolkningsmodel, randbetingelser og vandbalance, valg af kode og begrænsninger/usikkerheder i modelapproach, modelopsætning og specifikation af konfiguration, randbetingelser, beregningsgrid, beregningslag, enheder og parametre, grundvandsdannelse, afstrømning, grundvands-overfladevandsinteraktion, kalibrerings- og simulerings- tidsperioder og nøjagtighedsmål og tilgængelige data og nødvendige data med henblik på fuldførelse af studiet
- enhver antagelse eller modifikation der er nødvendig med henblik på at forenkle den konceptuelle hydrogeologiske tolkningsmodel ved transformeringen til en matematisk model skal grundigt dokumenteres

De hollandske retningslinier (Waveren et al., 1999) fremhæver nogen problemområder i forbindelse med modelopstilling:

- i mange grundvandsmodelprojekter er de vertikale hydrauliske ledningsevner ofte vanskelige at estimere (variation på typisk faktor 10 til 100), hvorimod den horisontale hydrauliske ledningsevne for magasiner er væsentligt bedre bestemt (faktor 2); lokale "vinduer" i lavpermeable lerlag kan medføre meget større regionale effekter end lokale områder med høj ledningsevne og visa versa: lokale områder med meget lav vertikal hydraulisk ledningsevne i lavpermeable lerlag, vil næppe have nogen væsentlig indflydelse på de regionale strømningsforhold, hvorimod lokale områder i grundvandsmagasinet med lav horisontal hydraulisk ledningsevne, har stor betydning for regionale potentiale- og strømningsforhold
- reduktion af gridstørrelse i beregningsnettet og i tidsskridt vil medføre bedre modelresultater som følge af mindre fejl på den numeriske løsning; et meget fint grid vil imidlertid give udseende af en meget detaljeret og derfor også meget nøjagtig model, selvom dette ikke nødvendigvis er tilfældet; informationstætheden på den skala modellen arbejder skal således være fuldt indbygget f.eks. grøfter, dræn, og variation i

parameterværdier på den finere skala og i mange tilfælde er der ikke det tilstrækkelige datagrundlag til at gennemføre dette; afpas derfor detaljeringsgraden efter datagrundlaget!

- der er behov for speciel opmærksomhed omkring vertikal diskretisering. En tilnærmet 3D model er måske tilstrækkelig til modellering af strømning og vandbalanceforhold; tilnærmet 3D betyder her at vertikale forskelle i trykniveau kan negliceres i beregningerne; dette betyder ikke at der ikke kan forekomme vertikale strømningsskomponenter; skematiseringen af vandførende lag og lavpermeable lag bør foretages med stor omhu, da ukorrekte antagelser kan give anledning til væsentlige fejl i modellen.

C.3 Modelkalibrering og -validering

USGS har udarbejdet metoder og retningslinier for modelkalibrering ved hjælp af invers modellering baseret på ikke lineær regression (Hill, 1998; Poeter and Hill, 1998). Disse retningslinier passer ind i den ovenfor beskrevne modelprotokol, med en udbygning af trinnene vedr. kalibrering, simulering, tilhørende usikkerhedsanalyser og test af forskellige hydrogeologiske tolkningsmodeller (konceptuelle modeller). De af USGS opstillede retningslinier består af i alt 14 gode råd i effektiv modelkalibrering. Som nævnte ovenfor er disse rettet mod den erfarne modellør.

ASTM D5490-93 beskriver teknikker anvendt i forbindelse med kalibrering af en model i forhold til målte felldata. Guiden beskriver kvantitative (statistiske) og kvalitative mål for graden af overensstemmelse mellem simuleringer og stedspecifikke data relateret til det fysiske hydrogeologiske system. Anbefaler kalibrering forhold til et antal forskellige hydrologiske påvirkninger med henblik på at adressere problemet med "entydighed" .

ASTM D5981-96 definerer kalibrering som en proces hvorved modellens repræsentativitet af den hydrogeologiske ramme, hydrauliske forhold og randbetingelser detaljeres med henblik på at opnå en ønsket grad af overensstemmelse mellem simuleringer og grundvandsstrømningssystemet. Kalibrering kan også defineres som en metode til at variere randbetingelser, parameterværdier etc. (indenfor et realistisk interval) med henblik på at opnå en acceptabel "match" mellem simuleringer og målte data. Denne sidste definition tillader ikke iterationer i kalibreringsprocessen, der også indebærer en raffinering af den konceptuelle model. Trinnene i kalibreringsprotokollen omfatter 1) fastsættelse af kalibreringsmål, 2) fastlæggelse af acceptable kvantitative nøjagtighedskrav, 3) identifikation af kalibreringsparametre (normalt hydrauliske ledningsevner og magasintal) samt 4) "history matching" (der findes desværre ikke noget godt dansk udtryk for dette begreb). "History matching" er anvendelse af "trial and error" og/eller automatiske metoder (f.eks. invers modellering) med henblik på at opnå den ønskede overensstemmelse mellem simuleringer og det fysiske system. Guiden præsenterer kalibreringsprocessen i deskriptive termer, med reference til ASTM 5490 for kvantitative metoder til fastlæggelse af nøjagtighedskriterier.

Udkastet til de australske retningslinier (Middlemis, 2000) fastlægger følgende mht. kalibrering og validering bl.a.:

- det anbefales at en model kalibreres i forhold til forskellige hydrologiske forhold (tørre / våde perioder og forskellige påvirkninger) og at kalibreringen opnås med hydrauliske ledningsevner og andre parametre som er konsistente med målte værdier, idet dette bidrager til adressering af entydighedsproblemet i modelkalibrering

- i tilfælde af automatisk kalibrering, så inkluder så mange parametre som muligt for "simultan" identifikation, men begræns antallet af parametre til dem som er nødvendige for at beskrive den kendte rumlige og tidslige struktur i magasin forhold og påvirkninger
- acceptkriterier for modelkalibrering bør bedømmes i forhold til vandbalance, residualafvigelser og kvalitative nøjagtighedskriterier, og i forhold til valgte "fornuftige" kvantitative nøjagtighedskriterier
- de valgte kvantitative nøjagtighedskriterier (kalibreringsmål) bør diskuteres og der bør skabes enighed om disse mellem rekvirent, projektmanager, modellør, og model reviewer, og de bør være genstand for yderligere forhandling på forskellige trin i arbejdet
- kalibrerede modeller bør verificeres ved at køre modellen i "predictive mode" og tjekke om simuleringen matcher observationer fra et "reserveret" datasæt, som ikke har været benyttet til kalibrering af modellen; sensitivitetsanalyser bør også gennemføres

De hollandske retningslinier omtaler problemstillingen med at arbejde med en model med "for mange" frihedsgrader. En numerisk grundvandsmodel kan i princippet bestå af et stort antal elementer/blokke som i princippet kan tildeles egne parameterværdier. Dette kan resultere i op til tusindvis af "frihedsgrader". Som følge af en begrænset informationsmængde, både med hensyn til definition af den geologiske struktur og med hensyn til observationer af trykniveau og koncentrationer, er det særligt vigtigt at antallet af frihedsgrader reduceres mest muligt. Dette kan sikres ved at processere parameterværdier på en gennemskuelig måde, f.eks. ved at "zonere" modelområdet i et begrænset antal områder, som tildeles samme parameterværdier. En faldgruppe i denne forbindelse består i at den struktur der modelleres gøres så detaljeret at den er svær at arbejde med i modelleringsprocessen en anden faldgruppe hænger sammen med at data ofte har gyldighed på en anden skala end den modellen arbejder med (og at man som følge heraf må arbejde med "effektive parametre").

Stationære modeller benyttes ofte og disse modeller negligerer magasineringseffekter og kan kun beskrive gennemsnitsstrømningsforhold. Princippet i en stationær model er at man arbejder på en situation hvor det antages at ændringer i tid kan negligeres. Observationerne til en stationær kalibrering stammer fra en dynamisk situation og dette kan medføre alvorlige fejl, for systemer med en stor langtidshukommelse.

C.4 Model simulering og usikkerhedsanalyse

ASTM D5611-94 beskriver teknikker til udførelse af følsomhedsanalyser med henblik på tilvejebringelse af kvantitative relationer mellem modelresultater og hydrauliske parametre eller randbetingelser. Følsomheden af en model er variationen af en eller flere modeloutput (f.eks. trykniveau eller vandbalance) som følge af variationen i en eller flere input (normalt hydraulisk ledningsevne eller randbetingelser). For at fastlægge usikkerheden på modelresultater, skal denne proces udføres for både kalibrerings og simulerings simuleringerne. Guiden introducerer følsomhedstyperne I til IV, hvor IV indikerer betydelig modelprognose usikkerhed, fordi ændringer i input for denne type producerer ikke signifikante effekter på kalibreringen, men signifikante effekter på simuleringerne. Dette indikerer at uafhængige målinger eller bestemmelse af disse "sensitive" parametre er kritiske med henblik på at reducere usikkerheden.

ASTM D5718-95 udstikker forslag til grafisk og skreven præsentation af modelrapporter, så vel som anbefalinger til arkivering af modelopsætning, med henblik på inkludering af dokumentation af information genereret under udviklingen af modellen.

Udkastet til de australske retningslinier (Middlemis, 2000) behandler usikkerhed og simulering på følgende vis, bl.a.:

- modelløren bør skitsere metoden for usikkerhedsanalyse, og indikere hvordan resultater vil blive præsenteret på en meningsfuld måde i relation til formålet med modelstudiet
- under trial-and error kalibrering, bør der gennemføres en (delvis) følsomhedsanalyse med henblik på at forbedre modellørens forståelse og accelerere kalibreringsprocessen
- såfremt formålet med Hi Fi modeller er vurdering af den årlige grundvandsdannelse eller den udnyttelige ressource, en post-processing af model vandbalancen bør gennemføres med henblik på tilvejebringelse af en sandsynlighedsfordeling for den totale grundvandsdannelse
- med henblik på kvantificering af usikkerheder på systempåvirkninger bør der for korte simuleringsperioder (f.eks. mindre end 10 år) som minimum gennemføres en omfattende scenario analyse, og hvor det er vigtigt at kvantificere risiko, bør en stokastisk metodik benyttes
- for Hi Fi modeller bør usikkerhed på magasinparametre håndteres ved udførelse af en Monte Carlo analyse
- rapportering skal ske ved bestemte milepæle med henblik på review af tekniske og kontraktmæssige fremskridt; som minimum anbefales rapportering efter konceptuel model, kalibrering og simuleringer
- modelarkivering bør bevares med henblik på gen-åbning af modellen for review og/eller fremtidig detaljering af modellen
- der gives omfattende retningslinier for "model appraisal", "peer review", "model audit" og "post-audit".

De hollandske retningslinier (Waveren et al., 1999) beskriver nogle faldgrupper omkring brug af modellen som et prognose værktøj. De nævner et velkendt eksempel nemlig at man kalibrerer en model på baggrund af gennemsnitssituation og herefter anvender modeller til simulering af særlig våd eller tør periode. Et andet eksempel vedrører modeller som er meget afhængige af grundvandsdannelsen fra "topsystemet". På grund af kompleksiteten af de øvre jordlag/vegetation mm. bruger man ofte mange ressourcer på at kalibrere disse forhold. Hvis modellen imidlertid skal anvendes til vurdering af effekter på ændringer for de dybe grundvandsmagasiner, så er de lavpermeable "adskillende" lag mindst lige så vigtige at fokusere på under modelkalibreringen. Hvis kalibreringsperioden er karakteriseret af relativt små trykniveaugradienter mellem øvre og dybe magasiner, så er det vanskeligt at kalibrere lækagekoefficienten (den vertikale hydrauliske ledningsevne) for disse lavpermeable lag, selvom denne parameter vil være en helt afgørende faktor ved simuleringerne af ændrede påvirkninger af systemet.

Appendix D: Beskrivelse af erfaringer med modeldatabase for Københavnsområdet og National Vandressourcemodel

D.1 Erfaringer med modeldatabase for Københavnsområdet

Københavns Amt tog i december 1993 initiativ til nedsættelse af en modelfølgegruppe med en koordinerende funktion omkring det modelleringsarbejde som iværksattes indenfor de administrative enheder i Københavnsområdet (DGU, 1995). For en ny model skulle der oprettes en fil med oplysninger om modellen og navnene på de "modelopsætningsfiler" der hørte til den pågældende model. Desuden skulle der udarbejdes et kvalitetsdokument som beskrev information om modellens tilblivelse, forudsætninger for modelarbejdet samt andre oplysninger af betydning for afklaring af modellens kvalitet.

Modeldata-basen for Københavnsområdet blev fysisk placeret hos fagdatacentret GEUS. Hermed sikres det, at databasen fysisk var placeret på et sted, hvor også en stor del af de data som indgår i grundvandsmodellering var registreret. Desuden sikredes det at modeldata var placeret offentligt tilgængeligt. Det geografiske opland til modeldata-basen er senere blevet udvidet til Sjælland og kan i princippet udvides til at gælde en database for modeller fra hele landet (i takt med at GEUS opstiller den nationale vandressourcemodel for hele landet, DK-modellen).

Grundprincippet ved indberetning af modeldata har ikke været at fastlægge en standard for modelrapportens udformning, men derimod at udarbejde et tillægs dokument (kvalitetsdokument), som sammen med det indberettede modeldatasæt beskriver de basale oplysninger om et modelprojekt, opstilling, kalibrering mv.

Erfaringer med modeldata-basen er delte (Henriksen, 1997). Der er lagt mellem 10 og 20 modeller ind i database (typisk modeller opstillet af et rådgivende firma for Københavns amt), men stort set ikke udtrukket nogen regionale modeller fra basen, hvis man ser bort fra de opsætninger fra den nationale vandressource model som også er lagt ind i databasen. Disse er udtrukket til forskellige brugere (amter/rådgivere) for en del områder.

Det har desuden vist at modeldata-basen var tung at arbejde med og derfor gik man i 1998 over til blot at indlæse modelopsætning fra f.eks. CD rom i en directory struktur, hvorved en række tværgående søgefaciliteter blev opgivet. Det var dog en nødvendig foranstaltning som følge af et behov for en begrænsning af driftsomkostningerne, idet brugerfinansieringen til administration og vedligeholdelse af databasen var baseret på udtræk fra basen (som altså var meget begrænsede). Der blev i forbindelse med omlægningen

af databasen udsendt en ny vejledning i indberetning (GEUS rapport nr.1998/26). Denne vejledning kan hjemtages fra www.vandmodel.dk.

Hvis man skal forsøge at sammenfatte erfaringer med modeldatabasen så kan følgende uddrages:

- den landsdækkende modeldatabase hos GEUS bør bibeholdes så der centralt findes en opdateret oversigt over hvilke modeller der foreligger for forskellige områder; modeldatasæt bør indberettes på CD rom (eller lignende) til GEUS med henblik på mulighed for opdatering af den landsdækkende vandressourcemodel og opdatering af hjemmeside om grundvandsmodeller med links til amter/rådgivere som har udført modelarbejdet
- standardiserede modelrapporter bør tillige indberettes på CD-rom f.eks. i pdf-format, idet det vurderes at kvalitetsdokumentet ikke er et tilstrækkeligt grundlag for vurdering en given modelopsætnings kvalitet og videre brugbarhed (kan evt. lægges ind på modeldatabasens hjemmeside)
- udveksling af de konkrete modeldatasæt, filer mv. bør fremover ske direkte mellem amter (eller rådgivere som har udført modelarbejdet) og øvrige brugere; den landsdækkende modeldatabase ændres således til en "metadatabase" når det gælder modeller opstillet i amtskommunalt regi; udveksling af modeldata vedrørende den landsdækkende vandressourcemodel vil fortsat ske med GEUS som den centrale aktør

D.2 Erfaringer med National Vandressource Model

I forbindelse med arbejdet med den nationale vandressource model har der været arbejdet en del med en mere standardiseret rapportering af modelarbejdet, ligesom at der har været rettet fokus på kalibrering og validering af modellen (Henriksen, 2001).

Der har også gennem projektet været arbejdet en hel del med udvikling af metoder til bedre og mere tidssvarende tolkning af geologisk model. For Øerne er anvendt et koncept baseret på en manuel gridtolkning, i dag anvendes for Jylland slice-tolkning med anvendelse af ArcView/SAS mm., hvor den geologiske tolkning gennemføres på en måde så det er betydeligt lettere at opdatere den geologiske model med nye data der indsamles, f.eks. i forbindelse med detailkortlægning og zonerings.

Der er anvendt systematiske kalibreringsmetoder, hvor kvantitative kalibreringsmål har været opstillet før trial-and-error kalibreringen er gennemført med den dynamiske model. Der er foretaget en videreudvikling af MIKE SHE så Jyllandsmodellen i dag først kalibreres stationær ved automatisk kalibrering (invers modellering med UCODE), forud for den dynamiske kalibrering.

Med DK-modellen har der været gennemført modelvalidering ved såvel split-sample tests som proxy-basin tests.

Der er opstillet en række detailmodeller, hvor nye geologiske tolkningsværktøjer (f.eks. Geoeditor) er blevet introduceret og testet.

DK modellen er en væsentlig platform for såvel rådgivning til såvel amter som Miljøstyrelsen i de kommende år som forudsætning for at GEUS kan spille en konstruktiv rolle som fagdatacenter for grundvandsmodellering. Det er derfor

af afgørende betydning at DK modellen kører over i en driftsfase og fortsat opdateres og videreudvikles i de kommende år.

DK modellen kan bidrage til:

- indledende afgrænsning af følsomme områder (grundvandsdannelse /behov for kortlægning)
- input til randbetingelser, parameterverdier mm. for mere detaljerede modelopstillinger
- retningslinier for modelopstilling og kalibrering (retningslinier, stabi, kurser mm.)
- regionale vurderinger af ressourcens størrelse (klima, arealanvendelse, vandindvinding)
- nationale rapportering af vandbalanceforhold og pejleresultater (NOVA 2003)

DK modellen er desuden en fremragende platform for forskningsprojekter i de kommende år. Af forskningsemner som i de kommende år vil være afhængig af DK-modellen kan nævnes:

- usikkerhedsvurdering
- klimaforskning – vandressourceaspekt
- Vandmiljøplan, nitrat
- optimering af overvågningssystemer
- on-line varsling af tilstand (kvalitet og kvantitet)
- kobling med "remote sensing"

DK modellen forventes færdiggjort medio 2001 og resultater og en ny vurdering af udnyttelig grundvandsressource i Danmark forventes rapporteret i en temarapport om vandets kredsløb, som færdiggøres ultimo 2001.

For mere information: www.vandmodel.dk

Appendix E: Sammenligning af forskellige modelkoder

E.1 Brugerinterface og modelkode

Modelkoder er computerprogrammer som indeholder algoritmer til numerisk løsning af ligninger for fysiske strømningssprocesser. De fleste modelkoder indeholder grafiske bruger interfaces til præ- og postprocessing af modeldata.

Modelkoden indeholder følgende:

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

Den numeriske model giver mulighed for en beskrivelse af strømningssprocesser herunder kompleks geometri, dynamisk påvirkning af systemet og rumlig og tidlig variabilitet, og er derved mere generelt anvendelige end analytiske modeller (f.eks. WinFlow og TwoDan). Analytiske eller semi-analytiske løsningsmetoder er ikke omtalt nærmere her.

Med henblik på facilitering af data input, strømningssimulering og resultatbehandling, benytter de fleste modelkoder grafiske bruger interfaces (graphical user interface – GUI, på dansk: ”skal”), baseret på f.eks. Microsoft Windows. Proces overvejelser mm. i forbindelse med valg af kode er omtalt i Brun (2000a).

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 kan følgende koder (motorer) fremhæves (se tabel E.1):

- Modflow
- Modflow-Surfact
- ModflowT
- MIKE SHE

Og følgende grafiske bruger interfaces (skaller), se tabel E.2:

- Groundwater Vistas (GV)
- Modflow-Surfact (MS-VMS, nb. Modflow-Surfact99 benytter GV som interface)
- Processing Modflow (PMWin)
- Visual Modflow (VM Pro)
- Groundwater Modeling System (GMS)

- MIKE SHE

Herudover findes forskellige finite-element motorer: f.eks. Aquifem-N, Aqua3D, Femwater, Sutra og Feflow. Femwater, SUTRA og FEFLOW giver mulighed for umættet zone beregninger og densitetsbetinget strømning. Nærmere oplysninger om SUTRA, AQUA3D, FEFLOW og Femwater kan fås på <http://www.scisoftware.com> . Priserne på disse koder ligger fra ca. 10.000 kr op opefter. En del af koderne har deres egne interfaces, bortset fra Femwater som kan køres vha. GMS. I princippet giver FE koderne nogen fordele i form af mulighed for bedre tilpasset modelgrid / diskretisering f.eks. 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 f.eks. udvekslingen mellem grundvand og vandløb, med ligeså bredt et spektrum af forskellige procesantagelser eller randbetingelsestyper, som f.eks. 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 (f.eks. 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, seneste version er MODFLOW-2000 i version 1.1 fra 17. januar 2001 se <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware>).

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”.

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>)

E.2 Anbefalinger vedr. valg af kode og brugerinterface

Ønskes opstillet en *integreret vandressourcemodel* som omfatter samtlige komponenter i ferskvandskredsløbet (umættet-mættet zone strømning, overfladisk afstrømning, drænvandsafstrømning og vandløbsafstrømning mm.) anbefales MIKE SHE anvendt (Brun, 2000a).

Ønskes en *grundvandsmodel som omfatter koblet umættet og mættet zone beskrivelse* anbefales MODFLOW-SURFACT-99 (3D umættet zone) eller MIKE SHE (1D umættet zone). Som rodzonemodel anbefales Daisy, Macro eller MIKE SHE afhængigt af det konkrete formål og konceptuelle model.

Ønskes en ren *grundvandsmodel*, og med forenklet beskrivelse af umættet zone og vandløbsafstrømning anbefales MODFLOW. Der findes en række forskellige brugerinterfaces til MODFLOW. GEUS anvender Groundwater Vistas i forbindelse med kurser i grundvandsmodellering for bl.a. amtsfolk (pt. GV version 2, i næste kurser forventes anvendt GV version 3, som understøtter MODFLOW-2000, der indeholder væsentlige forbedringer i forhold til tidligere Modflow versioner). Der foreligger en række alternative muligheder bl.a. PMWIN, GMS, Visual Modflow Pro etc. Der foregår en betydelig udvikling omkring brugerinterfaces til MODFLOW. Ajourførte oplysninger findes på Internettet!

Det anbefales at anvende GIS til håndtering af konceptuelle modeller og datainput til den numerisk model. Efterbehandling af resultater af modelsimuleringer og sammenstilling med øvrige data kan også med fordel gennemføres med brug af GIS.

De fleste af ovennævnte modelsystemer supportere import/ og eksport til ArcView. Anvender man MapInfo henvises til Internettet for hvilke præprocessorer som supporterer import og eksport af f.eks. Modflow opsætninger til MapInfo.

Tabel E.1 Sammenligning af 3D grundvandsmodelkoder

	MIKE SHE	Modflow	Modflow Surfact	ModflowT
Type	3D flow og stoftransport	3D flow (stoftransport Moc3D, MT3D eller MODPATH)	3D flow og stoftransport	3D flow og stoftransport
Udvikler / support	DHI, Institut for Vand og Miljø, Danmark	USGS, USA	HydroGeoLogic, USA	Hydrosolve/HsiGeotrans, USA
Pris	Sælges med interfaces (se GUI tabel 16.2)	Public domain	2,600 US \$ (Modflow-Surface99)	500 US \$
Udveksling mellem grundvand og vandløb	Flere muligheder, bl.a. kobling til MIKE 11. Dokumentation i forhold til testcases er begrænset.	Flere muligheder. Veldokumenteret i litteratur. Der findes forskellige grader af detaljerings /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 16.2)	MIKE SHE (en ny forbedret objekt orienteret Windows GUI under udvikling)	PMWin, Groundwater Vistas, Visual Modflow og GMS	Groundwater Vistas (kompatibel med PMWin, Visual Modflow og GMS)	Groundwater Vistas (Kompatibel med PMWin, Visual Modflow og GMS)
Kommentar	Veludbygget funktionalitet som integreret hydrologisk modelværktøj og dynamisk kredsløbsmodel (flow og transport). Koblinger både programmets styrke og svagt punkt. Unik vandressourcekode testet på DK-model.	Førende industristandard på verdensplan som grundvands- model. Udviklingen går dog relativt langsomt med "knopskydninger" i en række private koder. MODFLOW- 2000 nyeste standard, frigivet i august 2000 og opdateret januar 2001.	Indeholder speciel Newton Raphson solver, mættet/umættet strømning og stoftransport og multifasetransport af flygtige stoffer. Surface-99 kompatibel med bla. Groundwater Vistas, GMS 2.1, PMWIN. Surface- 2000 på vej.	Koden er primært en "forbedret" stoftransportmodel.

Tabel E.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 Pro	GMS	MIKE SHE
Ca. pris		1.400 US \$	2.000 US \$	2.000 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	MT3DMS, RTT3D 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		MT3D99		
Teleskop grid refinement (Sub-model)	Ja	Ja	Ja	Nej	Under udvikling	Ja
On screen views	Plan + tværprofil	Plan + tværprofil	Plan i flow,	Plan + tværprofil + 3D visualisering	Plan + tværprofil Desuden fence + 3D visualisering	Plan: 2D editor og river editor
Autokalibrering	UCODE, Pest (lite) Supportere PEST	UCODE, Supportere PEST	UCODE Pest (lite)	WinPEST	NEW PEST og UTCHEM	

Tabel 16.2 (fortsat)	GV	MS-VMS	PMWin	VM Pro	GMS	MIKE SHE
Følsomhedsanalyse	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, kriging mm.	Import og eksport i tekstfilformat (t0 og t2 filer). Konverter/extension til ArcView.
Nuværende udvikling	Udvikling i gang. Forventes at supportere MODFLOW-2000 og PEST-2000 i løbet af efteråret. Udvikling i gang omkring optimeringsværktøjer	Udvikling i gang mht. 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 menuesystem er enkelt og brugervenligt.	Udvikling i gang omkring nye interfaces til PEST og UTCHEM.	Udvikling i gang mht. ny MIKE ZERO windows interface. Forbedret stationær løser og simpel MIKE 11 routing under udvikling. Nye moduler: Geoeditor, UZ editor, HST3D og FE grundvand.
Kommentarer	God hjælp og support. Fuld support af nye release Modflow packages. God og billig kode. Velstruktureret. Udvikles af konsulentfirma i USA/UK. Standard i UK (EA)	Udvikler er et større konsulentfirma i USA. God stoftransportmodel. Ny version på vej der kan blive en konkurrent til MIKE SHE på kredsløbsområdet.	Udvikler er underviser ved Inst. For Groundwater studies ved University of Free State og aktiv i udvikling og publicering af en række grundvandssoftware	Udvikles af Canadisk konsulentfirma. God kode for begyndere og uerfarne modellerører (logiske og selvforklarende menuer)	Gode faciliteter til interpolation af geologisk model og geostatistik.	Unik vandressource model og dynamisk kredsløbsmodel. God 2D editor og MIKE 11 interface. Import/ eksport lidt mangelfuldt eller besværlig i MIKE SHE.

