

Kapitel 13 KALIBRERING AF STRØMNINGSMODEL

Torben Obel Sonnenborg
Hydrologisk afdeling, GEUS

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

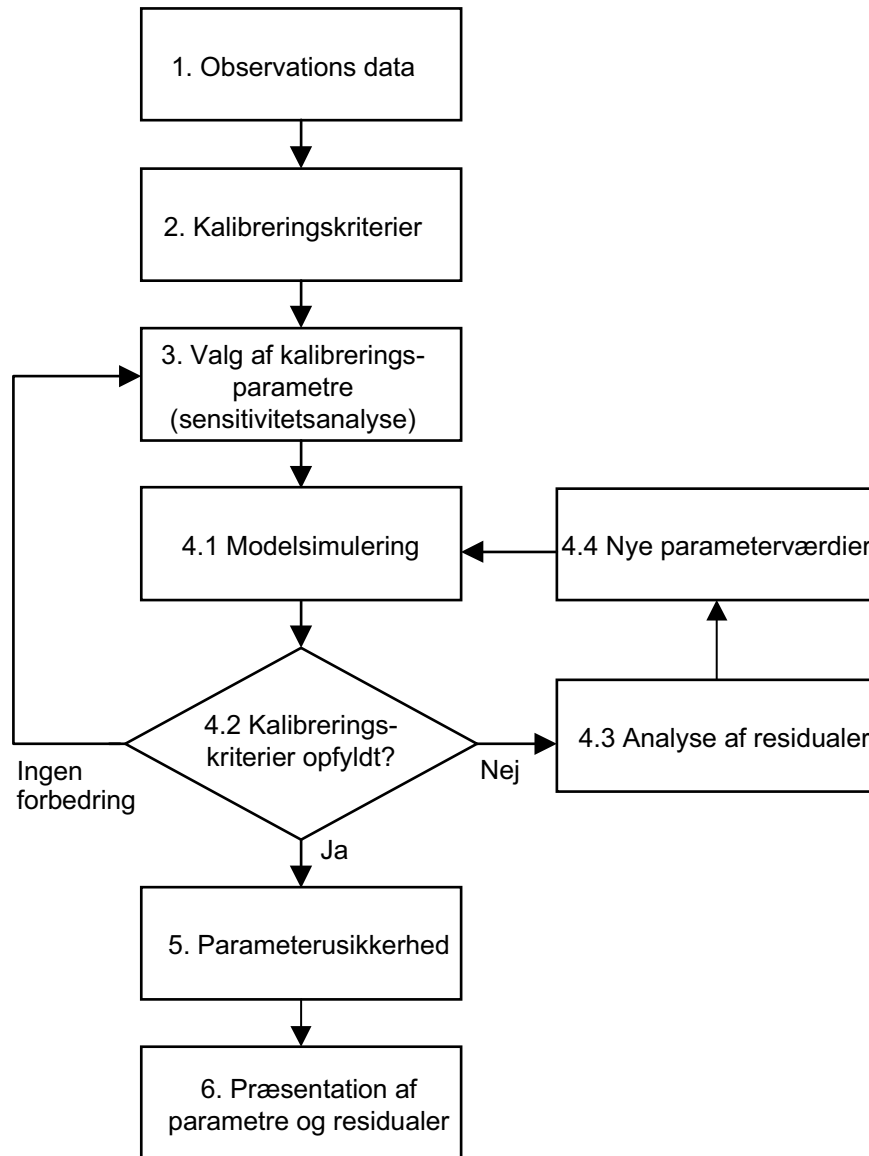
ABSTRACT: Kalibrering er en af de mest tidskrævende faser i modeludviklingen. Samtidig er det et af de mest kritiske trin i udviklingen af en pålidelig model. Det er derfor af afgørende betydning, at kalibreringsprocessen struktureres hensigtsmæssigt, hvis en optimal model skal opnås. I dette kapitel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

13.1 INDLEDNING

Anvendelsen af en numerisk model forudsætter, at parametrene, som indgår i de diskretiserede ligninger, f.eks. strømningens ligning (5.9), kvantificeres. I tilfældet med tredimensional ikke-stationær grundvandsstrømning, lign. (5.9), skal der for hvert numerisk element fastsættes værdier for de hydrauliske egenskaber udtrykt ved parametrene K_x , K_y , K_z , og S_s . Desuden skal såvel ydre som indre randbetingelser (se kapitel 7) fastlægges. Antallet af numeriske elementer vil stort set altid overstige antallet af målinger af de hydrauliske parametre, der er til rådighed i et givent område, og det er derfor nødvendigt at estimere parametrenes værdi. Dette kan gøres ud fra (1) de tilgængelige målinger af de hydrauliske parametre (f.eks. hydraulisk ledningsevne) eller (2) observerede værdier af systemets tilstandsvariable (f.eks. hydraulisk trykniveau).

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

Det bedste resultat opnås normalt, hvis modellens parametre estimeres vha. den anden metode, dvs. ud fra observationer af eksempelvis hydraulisk trykniveau. I dette tilfælde justeres parameter-værdierne med det formål at opnå en god overensstemmelse mellem målte og simulerede tilstandsvariable. Denne proces, hvor der estimeres parametre og randbetingelser, som gør strømningens modellen i stand til at reproducere f.eks. trykniveau- og vandføringsmålinger med en på forhånd givet præcision, benævnes modelkalibrering eller blot kalibrering. I kalibreringsprocessen tilpasses parametrene med det formål at minimere residualerne (afvigelsen mellem observeret værdi og modelresultat). Herved opnås parameterestimer, som gør modellen i stand til at reproducere systemets opførsel i kalibreringsperioden (tidsperioden hvorfra data, der anvendes til kalibrering, stammer fra), med forhåbentlig acceptabel præcision. I den efterfølgende valideringsfase (kapitel 15) vurderes det, om modellen også er i stand til at forudsige det fysiske systems opførsel i valideringsperioden.



Figur 13.1 Kalibreringsprotokol, hvor de enkelte trin i kalibreringsprocessen er opført.

Kalibreringen er et af de sværeste skridt i opstilling af en operationel grundvandsmodel, og vil ofte være den fase i modeludviklingen, som kræver det største tidsforbrug. Kalibreringsprocessen kan være vanskelig og frustrerende at gennemføre, specielt hvis der ikke følges en stringent fremgangsmetode. Figur 13.1 viser, hvorledes kalibreringen af en grundvandsmodel med fordel kan gennemføres. Den såkaldte kalibreringsprotokol angiver de skridt, der tages i kalibreringen af modellen. Observationsdata er en basal forudsætning for at kunne gennemføre en kalibrering. Det er vigtigt dels at inddrage de relevante data (typisk pejledata og afstrømningsdata), dels at vurdere usikkerheden på de anvendte observationer. Det næste skridt i kalibreringsprocessen består i at opstille både kvantitative og kvalitative kriterier for, hvor præcist modellen skal reproducere de observerede værdier. De første to skridt i kalibreringsarbejdet er beskrevet i kapitel 12, og vil ikke blive omtalt yderligere her. Derefter skal det analyseres, hvilke modelparametre, der skal udvælges som kalibreringsparametre. Til dette formål vil både en analyse af det fysiske system samt en sensitivetsanalyse af potentielle kalibreringsparametre med fordel kunne udføres. Efter de tre indledende faser er gennemført, kan selve estimationen foretages (4.1 – 4.4 i figur 13.1). Denne iterative proces forløber ved successivt at ændre værdierne af kalibreringsparametrene. Ændringerne foretages på basis af en analyse af residualerne, enten ud fra en fysisk indsigt i det modellerede system, ved gennemførelse af

en detaljeret sensitivitetanalyse eller ved anvendelse af invers modellering (se kapitel 14). Estimationsprocessen kan afsluttes med en analyse af usikkerheden på de estimerede kalibreringsparametre. Endelig skal resultatet af kalibreringen rapporteres, hvilket inkluderer præsentation og vurdering af optimerede parametre og simuleringresultater. I de følgende afsnit vil hvert element i kalibreringsprotokollen blive gennemgået.

13.2 KALIBRERINGSPARAMETRE

13.2.1 *A-priori viden om parametre*

Alle typer af parametre, som indgår i en grundvandsmodel, kan principielt set inkluderes i kalibreringsprocessen. Det er imidlertid primært de hydrauliske parametre, oftest den hydrauliske ledningsevne, som tilpasses, men også lækagekoefficienter, magasinkoefficienter m.m. kalibreres. Andre parametertyper som randbetingelser (flux gennem rand, nedsivning) og empiriske parametre (bl.a. tidskonstanter) kan estimeres. Der er dermed meget brede grænser for antallet af kalibrerede parametre, ligesom der kan indgå mange typer af parametre i estimationen.

Det forudsættes her, at der under opstillingen af den hydrogeologiske tolkningsmodel er foretaget en parametrisering, hvor antallet af frie parametre er reduceret betydeligt i forhold til antallet af numeriske celler. F.eks. vil reservoiret normalt blive inddelt i en række geologiske enheder (f.eks. moræneler, smeltevandssand, osv.), indenfor hvilke de hydrauliske egenskaber rumlige struktur antages kendt (f.eks. homogen fordeling, lineær funktion af stedet eller geostatistisk model). Parametriseringen er nødvendig for at kunne bestemme parameterværdierne, men samtidig medfører denne integrerede beskrivelse af store områder, at der ofte vil være uoverensstemmelse mellem parameteren målt i det fysiske system og den "effektive" modelparameter, som er optimal i modellen. Samtidig kan der være stor forskel på parameterværdier målt eksempelvis på borekerner, ved slugtest, ved korttids- og langtidsprøvepumpning. De fire målinger repræsenterer en skala af størrelsesorden 0.1 m til 1000 m, og kan pga. den geologiske heterogenitet afvige markant fra hinanden (se kapitel 11 eller f.eks. Schulze-Makuch & Cherkauer, 1998).

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

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

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

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

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

13.2.2 Valg af kalibreringsparametre

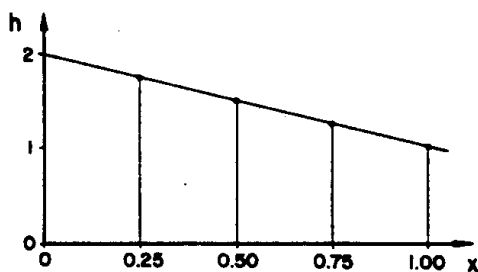
Følgende forhold skal tages i betragtning, når kalibreringsparametrene udvælges: (1) De skal være identificerbare, (2) de skal være relativt dårligt kendt, (3) de simulerede tilstandsvariable skal være tilstrækkeligt sensitive overfor ændringer i parameteren, (4) antallet af parametre skal minimeres.

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

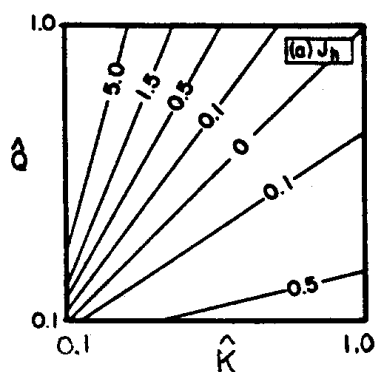
Et meget simpelt tilfælde på ikke identificerbarhed optræder i forbindelse med en stationær løsning. Magasinkoefficienten vil her være ikke identificerbar, da parameteren ikke indgår i det opstillede ligningssystem. De mere komplekse tilfælde af ikke identificerbarhed optræder, hvor forskellige parameterkombinationer kan resultere i samme trykfordeling. I figur 13.2 ses et eksempel på denne type ikke-identificerbarhed. I en endimensional situation med stationær strømning i et homogent medium med fastholdt tryk ved $x = 0$ og konstant flux Q ved $x = 1$ er den hydrauliske ledningsevne K og fluxen Q ikke identificerbare samtidigt, da trykniveauet kun er følsomt overfor forholdet mellem K og Q . Konturlinierne for objektiv funktionen (en norm af typen (12.5)) ses på figur 13.2b. Uendeligt mange kombinationer af K og Q kan resultere i samme trykniveauafdeling og dermed minimumsværdi af objektiv funktionen, og parametrene er derfor ikke identificerbare simultant.

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

Kalibreringsparametrene vælges bedst blandt de modelparametre, der dels har størst indflydelse på strømningssimuleringerne og dels er dårligst kendt. Nogle modelparametre og -variable vil være relativt velkendte. F.eks. vil nedbøren (under danske forhold) ofte være kendt ud fra målinger, ligesom visse randbetingelser (f.eks. trykniveauet i veldefinerede vandområder) kan være velkendte. Det vil derfor være mere efficient at inddrage andre parametre i estimationsprocessen.



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



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

Informationsniveauet kan for andre parametres vedkommende være meget sparsomt, men af fysiske årsager kan parameteren være bundet til et snævert interval. F.eks. vil porøsiteten ofte kunne skønnes indenfor en margen på en faktor to alene ud fra en geologisk kvalitativ beskrivelse af bjergarten. I modsætning kan en parameter som den hydrauliske ledningsevne variere indenfor flere dekader, og det er derfor vigtigere at få fastlagt værdien af en sådan parameter. Den hydrauliske ledningsevne har desuden afgørende indflydelse på både beregningen af trykniveau, strømningssveje og forureningsudbredelse og er derfor den parameter, som hyppigst anvendes som kalibreringsparameter.

Til den endelige udvælgelse af kalibreringsparametre er en simpel sensitivitetsanalyse et stærkt redskab. Ved denne metode eksekveres modellen en eller to gange for hver parameter. Hver gang modellen køres, ændres værdien af en parameter lidt (5 – 25 %) fra dens initiale værdi, og den resulterende påvirkning af de simulerede tilstandsvariable registreres (ofte udtrykt ved RMS-værdien). På baggrund af sensitivitetsanalysen vil det være muligt at identificere de modelparametre, som har størst indflydelse på afvigelsen mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel. Kalibreringsparametrene kan dermed udvælges på et objektive kriterium, og er ikke alene afhængigt af modellørens erfaring og subjektive vurderinger.

13.3 ESTIMATIONSTEKNIK

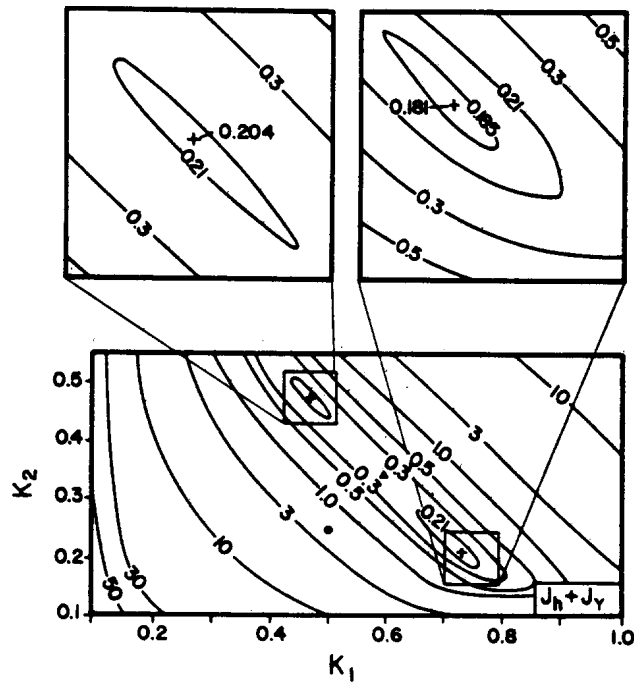
Estimationen af kalibreringsparametrene kan foretages enten ved manuel kalibrering eller automatisk kalibrering (invers modellering). Manuel kalibrering baserer sig på modellørens evne til successivt at ændre parameterværdierne, så modellen giver en forbedret beskrivelse af observationsdata. Den automatiske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

13.3.1 Entydighed

Begge teknikker kan have problemer med at estimere optimale parametre, hvilket i mange tilfælde skyldes problemer med entydighed. Entydighed angår den inverse relation, dvs. hvis forskellige parametersæt kan fremkomme fra samme observationsdatasæt, siges problemet at være ikke entydigt. Flere lokale minima i funktionen, der skal minimeres (f.eks. RMS-værdien, lign. 12.5), kan være årsag til ikke entydighed, se figur 13.3, ligesom manglende identificerbarhed (se afsnit 13.2.2) kan være det. Hvis antallet af parametre overstiger antallet af observationer, vil problemet ligeledes være ikke-entydigt.

Indenfor grundvandsmodellering er det imidlertid ikke muligt ad analytisk vej at bestemme, om et problem er entydigt. Derfor analyseres det, om problemet er identificerbart, og hvis det er tilfældet, er der god chance for, at problemet også er entydigt. Identificerbarhed er imidlertid ikke en tilstrækkelig betingelse for entydighed.

Problemet med manglende entydighed er altså ikke relateret til, hvilken estimationsteknik der anvendes, men udelukkende et spørgsmål om, hvordan problemet er formuleret. Generelt sikres entydighed bedst, hvis flere af følgende faktorer er opfyldt: (1) Flere forskellige observationstyper inddrages i kalibreringen, (2) Observationsdata er jævnt fordelt i sted og tid, (3) Usikkerheden på observationsdata er minimal, (4) Antallet af kalibreringsparametre er lavt, (5) Den valgte kombination af kalibreringsparametre er identificerbare, (6) Modellen udviser relativ stor sensitivitet (og relativt ens sensitivitet) overfor de udvalgte kalibreringsparametre, (7) Modellen kalibreres mod flere forskellige hydrologiske påvirkninger (f.eks. våd og tør periode).



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

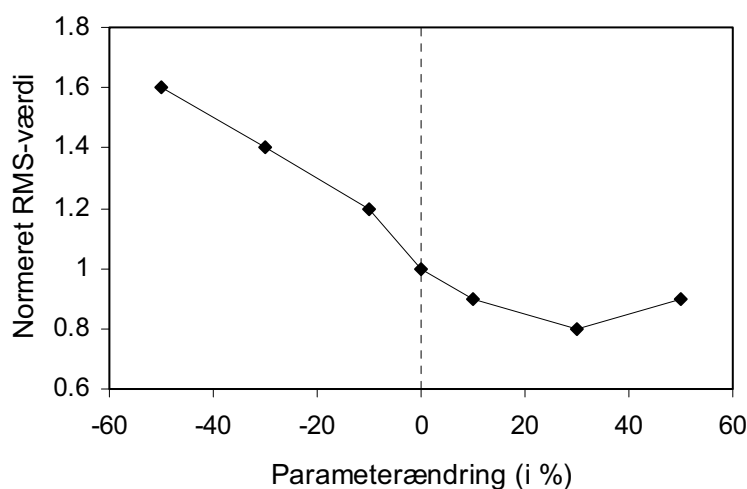
13.3.2 Manuel kalibrering ('trial-and-error' estimation)

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

Estimationsprocessen kan gøres betydeligt mere gennemskuelig, hvis der gennemføres en detaljeret sensitivitetsanalyse, hvor modellen eksekveres 4 til 10 gange for hver kalibreringsparameter. I hver enkelt kørsel ændres én parameters værdi med en specificeret faktor (f.eks. 0.5, 0.7, 0.9, 1.1, 1.3, 1.5), og f.eks. RMS-værdien beregnes for hver parameterværdi. Efterfølgende er det muligt at plote de beregnede RMS-værdier mod de testede parameterværdier og herved opnå et kriterium for, i hvilken retning og hvor meget parameterværdien skal ændres, for at opnå en bedre simulering af observationerne. I eksemplet illustreret i figur 13.4 ses, at der opnås en bedre beskrivelse af observationsdata, hvis den aktuelle kalibreringsparameter forøges med ca. 30%.

Ulempen ved den detaljerede sensitivitetsanalyse er, at der skal foretages mange modelsimuleringer for at kunne opdatere parametrene. Hver gang en parameter skal ændres, kræves der 4 – 10 modelkørsler. Med eksempelvis 10 parametre og 10 kalibreringsiterationer skal der foretages et sted mellem 400 og 1000 modelsimuleringer. Selv om den detaljerede sensitivitetsanalyse kan

automatiseres mere eller mindre (f.eks. i Groundwater Vistas, ESI, 1999), vil denne procedure ikke være attraktiv, hvis der eksempelvis arbejdes med en ikke-stationær model, som det tager af størrelsesorden 10 timer at eksekvere.



Figur 13.4 Resultat af detaljeret sensitivitetanalyse udført på en parameter vha. 6 modelsimuleringer. RMS normeret med RMS-værdien opnået for det foregående iterationstrin er anvendt som kriterium for parameterændringen.

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

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

13.3.3 Automatisk kalibrering (invers modellering)

I invers modellering sker estimationsprocessen 4.1 – 4.4 på figur 13.1 på baggrund af matematisk formulerede kriterier og foregår mere eller mindre automatisk. De inverse løsningsmetoder opdeles i direkte og indirekte teknikker. I den direkte metode forudsættes observeret hydraulisk trykniveau at være kendt i samtlige knudepunkter i det numeriske net, hvorved de styrende ligninger kan løses direkte mht. modelparametrene. I praksis er det imidlertid nødvendigt at interpolere ud fra relativt få observationer. De interpolerede data vil være fejlbehæftede, og sammen med

måle- og modelfejl er det problematisk for teknikken, da det ofte resulterer i ustabile løsninger, og metoden er derfor meget lidt anvendt. De indirekte metoder er baseret på at minimere afvigelsen mellem observeret og beregnet afhængig variabel, f.eks. trykniveau, og minder i princip meget om manuel kalibrering. Da parametrene er ikke-lineære funktioner af tilstandsvariablene foregår optimeringen iterativt. De indirekte inverse metoders formål at finde de modelparametre, som fører til en optimal overensstemmelse mellem observeret og beregnet afhængig variabel. Dette fører til definitionen af objektiv funktionen (f.eks. summen af afvigelses kvadrater, lign. (12.5)), således at minimering af objektiv funktionen fører til minimering af eksempelvis trykafvigelse. Minimum i objektiv funktionen findes typisk vha. gradientbaserede metoder (f.eks. Levenberg-Marquardts metode).

De inverse teknikker vil ikke blive beskrevet i detaljer her, idet der henvises til kapitel 14. Yderligere information kan findes i f.eks. reviewartiklen af Yeh (1986). Danske anvendelser af inverse metoder kan findes i f.eks. Keidser & Rosbjerg (1991), Sonnenborg et al. (1996) og Christensen et al. (1998). I Appendix B kan anvendelsen af invers modellering i forbindelse med DK-modellen desuden findes.

Begrundelsen for at indføre invers modellering er, at parametrene bestemmes ud fra objektive kriterier for afvigelsen mellem observeret og simuleret afhængig variabel. På grund af den systematiske måde hvorpå parametrene justeres vil der være større chance for at finde optimale parameterestimater end ved manuel kalibrering. Invers modellering kan være arbejdsbesparende, og metoden giver mulighed for at opnå en kvantificering af f.eks. parameterkorrelation og parameterusikkerhed.

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

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

13.4 PRÆSENTATION AF KALIBRERINGSRESULTAT

13.4.1 *Beskrivelse af kalibreringsprocessen (kalibreringsjournal)*

Modtageren af modelresultaterne vil sjældent være interesseret i en beskrivelse af udviklingen af de enkelte parametres værdi gennem den iterative optimering af modellen, hvor der typisk foretages mellem 50 og flere hundrede simuleringer. Det vil imidlertid være interessant at blive præsenteret for eventuelle ændringer i den opstillede model for kalibreringsprocessen, dvs. i de tilfælde hvor estimationsprocessen 4.1 – 4.4 i figur 13.1 ikke konvergerer indenfor de opstillede kalibreringskriterier, og det er nødvendigt at gå tilbage til trin 3 og modificere kalibreringsparametre eller den underliggende model. Da det kan være nødvendigt at revurdere modelopbygningen adskillige gange i kalibreringsforløbet, vil det være hensigtsmæssigt at præsentrere (eventuelt i tabelform) de bedste værdier af de benyttede normer (12.3) – (12.7) for hver model. Herved kan modtageren få et indblik i, hvilke ændringer der har været afprøvet, og hvad der har bidraget til at opnå en velkalibreret grundvandsmodel.

13.4.2 *Parameterestimerer samt deres usikkerhed*

De optimerede parameterverdier skal præsenteres, typisk i tabelform, men også en grafisk illustration af parameterverdierne kan anvendes. Samtidig skal der foretages en evaluering af de estimerede parametres fysiske relevans. I en grafisk illustration kan parameterintervallerne estimeret under analysen af tilgængelige feltmålinger (afsnit 13.2.1) sammenholdes med de optimerede parametre, hvilket gør det muligt at foretage en hurtig vurdering af, om de estimerede parametre holder sig indenfor eller i nærheden af fysisk realistiske grænser. I modsat fald skal det kommenteres, hvad årsagen til det usædvanlige estimat kan være.

Hvis der er ønske om at få undersøgt usikkerheden på de estimerede parametre, skal der genereres resultater, der kan belyse dette emne. Hvis der er udført manuel kalibrering kan usikkerheden vurderes vha. en detaljeret sensitivitetsanalyse, som er beskrevet under afsnit 13.3.2. Herved opnås et udtryk for modellens følsomhed overfor de analyserede parametre, og usikkerheden på parameterverdien kan derefter vurderes, idet den generelt kan antages at være omvendt proportional med modellens sensitivitet. Det er ikke muligt at kvantificere parameterusikkerheden direkte (f.eks. en standardafvigelse) vha. denne metode, men det kan vurderes, hvordan parametrene indbyrdes er rangeret mht. modelsensitivitet. Dvs. den mest sensitive parameter vil give det største påvirkning af f.eks. RMS-værdien i den detaljerede sensitivitetsanalyse, og vil være den parameter, der er forbundet med den mindste usikkerhed.

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

13.4.3 *Overensstemmelse mellem observationer og simulering*

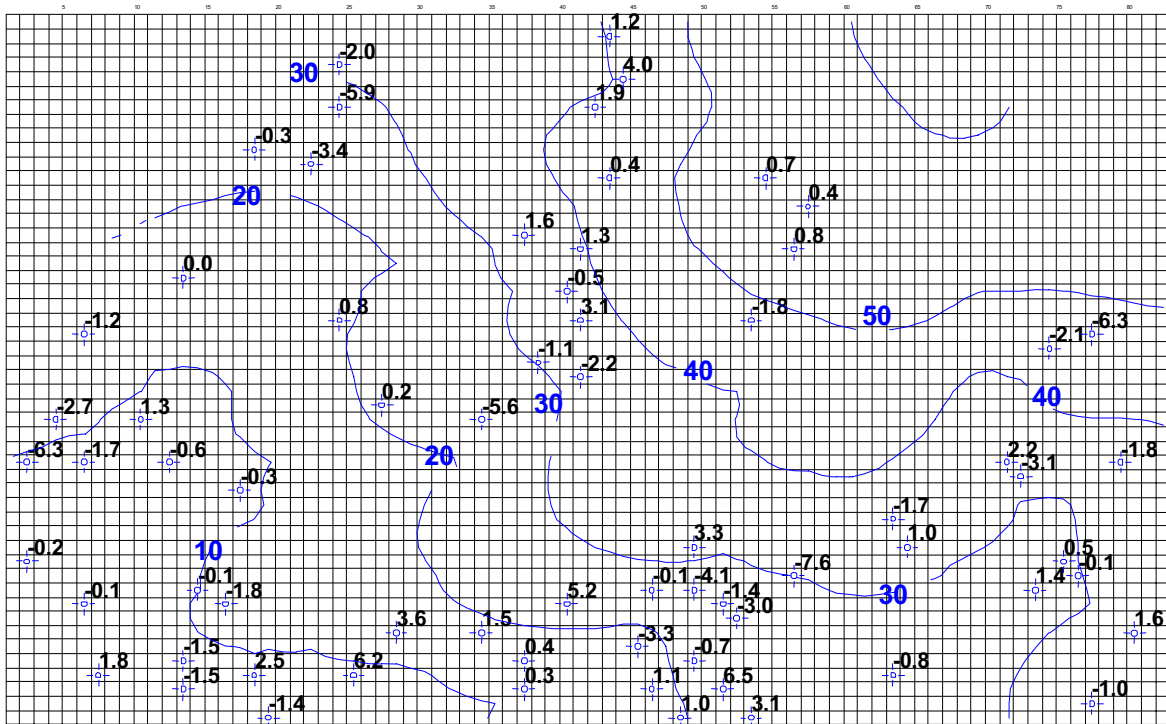
Kalibreringsresultatet skal altid afrapporteres i henhold til de kriterier, der er opstillet til arbejdet. Hvis der eksempelvis er stillet krav til maksimumverdier af ME og RMS, vil det være passende at præsentere de opnåede værdier eventuelt i tabelform, hvor det kan vises, hvor godt modellen simulerer de målte værdier i modelområdet. I tabel 13.1 er vist et eksempel fra Esbjergmodellen (appendiks A), hvor overensstemmelsen med (a) hele modellen under ét, (b) målinger af forskellig karakter og (c) målinger i modellens beregningslag præsenteres.

Tabel 13.1 Eksempel på rapportering af kalibreringsresultat i tabelform (Henriksen et al., 1995).

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

Fordelingen af overensstemmelsen mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel kan også præsenteres i en tabel, hvor placering af boring, tidspunkt for måling, observationsværdi, simuleret værdi og residual opføres. Det kan imidlertid hurtigt blive svært at overskue fordelingen af residualerne på denne vis, og præsentationer af denne type hører bedst hjemme i et appendiks til kalibreringsrapporten (om end resultaterne skal kunne findes). Den rumlige fordeling af modelresultaterne kan bedre vurderes ud fra et eller flere af følgende fire illustrationer. (1) Konturplot, (2) scatterplot, (3) residualplot eller (4) fejlniveauplot.

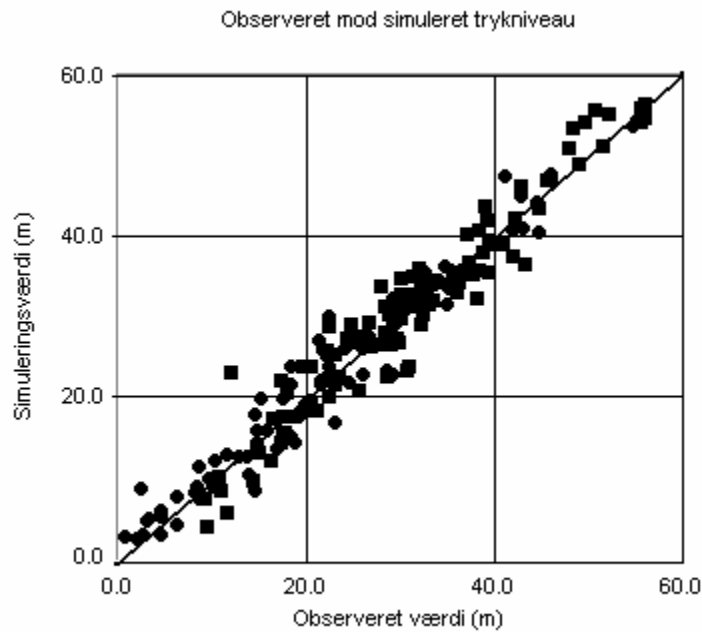
Figurer, der viser konturerede billeder af hhv. simuleret og observeret trykniveau, kan give et umiddelbart indtryk af, hvor godt modellen simulerer data. Imidlertid kan det være svært at vurdere afvigelsernes størrelse, ligesom der kan opstå store fejl i interpolationen af målte værdier. Det kan derfor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



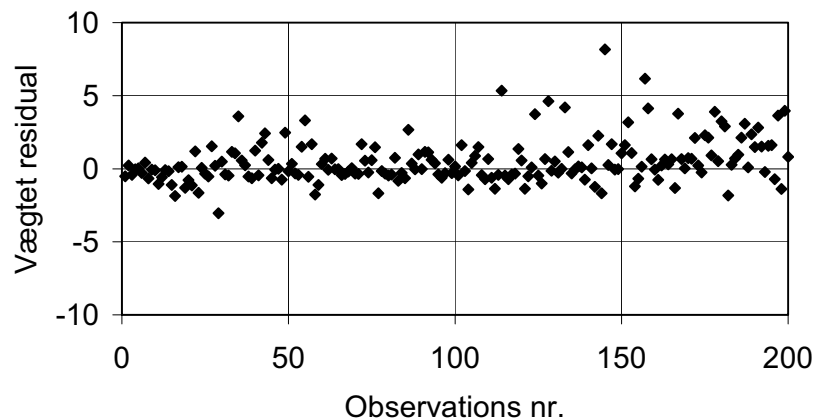
Figur 13.5 Plot fra Esbjergmodellen med konturerede simulerede trykniveauer (konturlinier) og punkter med afvigelser (residualer).

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

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

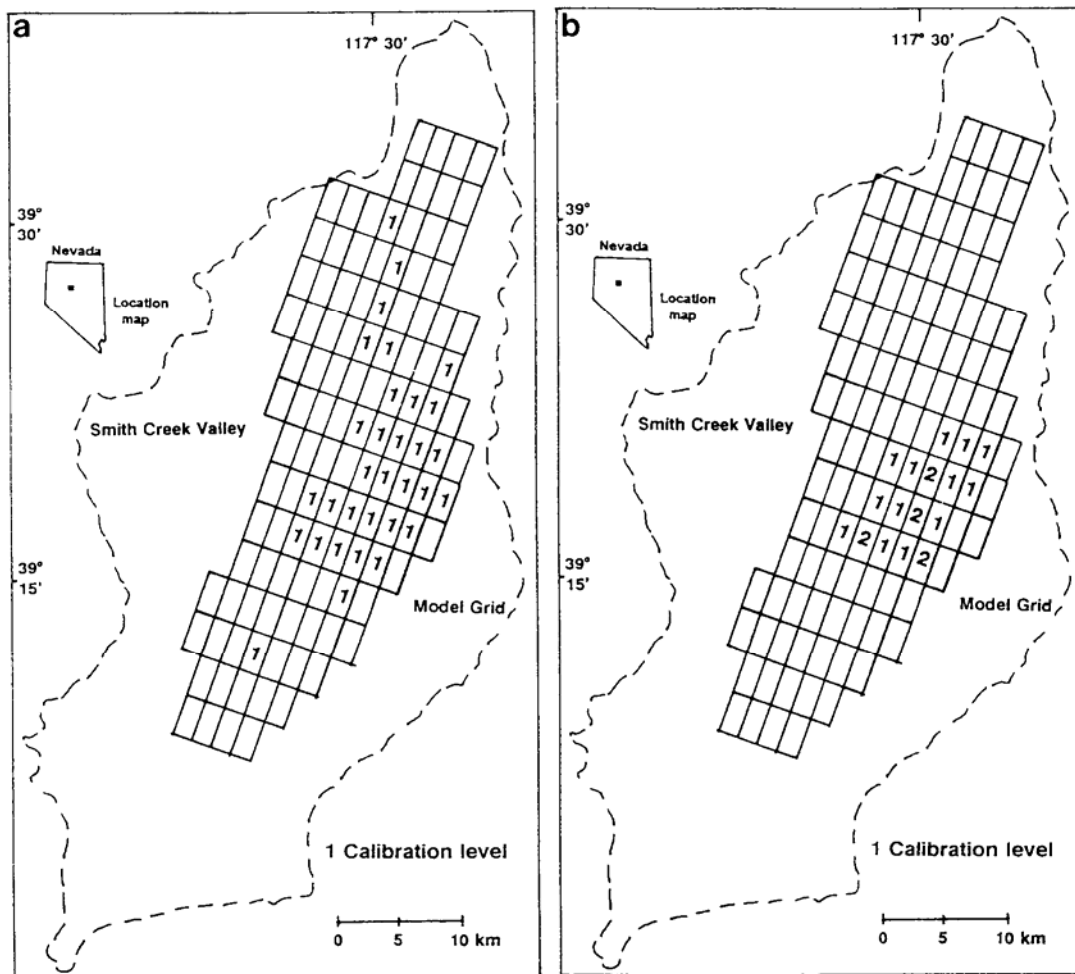


Figur 13.6 Scatterplot af simuleret mod observeret trykniveau (Esbjergmodellen, Appendiks A).



Figur 13.7 Residualplot af vægtede residualer (trykniveaudata) mod observationsnummer.

Det kan være en hjælp i evalueringen af den rumlige fordeling af modelleringsresultatet, at sammenholde residualerne med et af de anvendte nøjagtighedskriterier. Herved kan niveauet, hvormed den enkelte observation er simuleret, kvantificeres. Eksempelvis kan standardafvigelsen på observationsdata anvendes til opstilling af en række niveauer. Det kan vælges at karakterisere niveau 1 ved, at modellen rammer inden for observationsværdien \pm en standardafvigelse, niveau 2 ved observationsværdien \pm to standardafvigelser, osv. Den rumlige fordeling af niveauet, hvormed modellen simulerer data, kan herefter illustreres i en figur, der viser det numeriske net, hvor celler med observationsværdier tillægges en niveauværdi, se figur 13.8.



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

13.5 REFERENCER

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

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

Christensen, S. (1997) On the strategy of estimating regional-scale transmissivity fields, *Ground Water*, 35(1), 131-139.

Christensen, S., Rasmussens, K.R., Møller, K. (1998) Prediction of regional ground water flow to streams, *Ground Water*, 36(2), 351-360.

Doherty, J., Brebber, L., Whyte, P. (1994) PEST. Modelindependent Parameter Estimation. Watermark Computing.

ESI (1999) Guide to using Grounwater Vistas. Version 2.4. Herndon, Virginia.

- Gelhar, L.W. (1986) Stochastic subsurface hydrology. From theory to applications, *Water Resour. Res.*, 22(9), 135S-145S.
- Harrar, W., Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted Å aquifer system: Setup and calibration. Unpublished report. GEUS.
- Henriksen, H.J., Harrar, W.G., Morthorst, J., Nyegaard, P., Dahl, M. (1995) Nye vandindvindingsmuligheder for Esbjerg kommune. Fase IV – model. GEUS Kunderapport nr. 51.
- Henriksen, H.J., Knudby, C.J., Rasmussen, P., Nyegaard, P. (1997) National vandressource model. Modelopstilling og kalibrering for Fyn. GEUS undersøgelses rapport 1997/139.
- Hill, M.C. (1998) Methods and guidelines for effective model calibration. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005, Denver, Colorado, USA.
- Keidser, A., Rosbjerg, D. (1991) A comparison of four inverse approaches to groundwater flow and transport parameter identification. *Water Resources Res.*, 27(9), 2219-2232.
- Poeter, E.P., Hill, M.C. (1998) Documentation of UCODE:: A computer code for universal inverse modeling, U.S. Geological survey, Water Resources Investigations Report 98-4080, Denver, Colorado, USA.
- Refsgaard, J.C. (1997) Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models, *J. Hydrology*, 198, 69-97.
- Schulze-Makuch, D., Cherkauer, D.S. (1998) Variations in hydraulic conductivity with scale of measurement during aquifer tests in heterogeneous, porous carbonate rocks, *Hydrogeology Journal*, 6, 204-215.
- Sonnenborg, T.O., Engesgaard, P., Rosbjerg, D. (1996) Contaminant transport at a waste residue deposit .1. Inverse flow and nonreactive transport modeling, *Water Resour. Res.*, 32(4), 925-938.
- Yeh, W.W-G. (1986) Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem. *Water Resources Res.*, 22(2), 95-108.