

Kapitel 16 MODELLENS REPRÆSENTATIVITET

Torben Obel Sonnenborg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelantagelser, modelbegrænsninger, modeltroværdighed, modelanvendelse

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

16.1 INDLEDNING

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

16.2 MODELANTAGELSER

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

16.2.1 Procesbeskrivelser

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

I forbindelse med grundvandsmodellering vil der kunne anvendes forenklede procesbeskrivelser på primært følgende områder: (1) Strømningen i den mættede zone, (2) Infiltration/eksfiltration til/fra grundvandsspejlet, (3) Vandudveksling med vandlegemer såsom søer, vandløb og havet. I

det følgende gives to eksempler på modelantagelser, der relaterer sig til (1) og (2) ovenfor, og de resulterende implikationer for modelanvendeligheden vurderes.

I det tilfælde, hvor den mættede lagtykkelse af et frit magasin er stor i forhold til de sæsonmæssige fluktuationer af vandspejlet, kan det være forbundet med en relativ lille fejl at benytte ligningssystemet for et artesisk magasin, lign. (5.14), til at beskrive strømmingen i magasinet. Det skal imidlertid pointeres, at modellen sandsynligvis vil være uegnet til at beskrive et eventuelt oppumpningsscenario fra det frie magasin, hvor den mættede lagtykkelse og dermed transmissiviteten ændres betydeligt. Modellen vil med andre ord have begrænsede anvendelsesmuligheder, hvilket skal fastslås, så misbrug af modellen undgås.

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

16.2.2 Geometriske og geologiske forsimplinger

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

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

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

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

16.2.3 Randbetingelser

De mest stabile randbetingelser, der kan anvendes i en numerisk grundvandsmodel, er de såkaldte fysiske grænser, som er karakteriseret ved veldefinerede strukturer i systemet, som udgør naturlige grænser for grundvandsstrømningen. Lavpermeable bjergarter, vandløb og havet er eksempler på naturlige fysiske grænser, der er velegnet som randbetingelser til den numeriske model. Det kan

imidlertid være vanskeligt at repræsentere selv relativt veldefinerede grænser i en numerisk model, hvilket nedenstående eksempel illustrerer.

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

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

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

16.3 MODELLENS TROVÆRDIGHED

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

Troværdigheden af kalibreringsresultatet kan vurderes mht. de optimerede parametre. Hvis parametrene falder udenfor fysisk acceptable grænser (se kapitel 12), vil modellens troværdighed reduceres. Det samme vil være tilfældet, hvis de optimerede parametre vurderes at være forbundet med stor usikkerhed, f.eks. udtrykt ved et bredt konfidensinterval eller lav modelsensitivitet.

Modellens troværdighed er i høj grad relateret til resultaterne af valideringen. En generel dårlig reproduktion af målingerne vil naturligvis være et udtryk for en upålidelig model. I de fleste tilfælde vil modellen imidlertid være i stand til at simulere det fysiske system med variabel præcision. I nogle områder vil data være bedre reproduceret end i andre, ligesom en ikke-stationær model kan simulere systemets respons bedre til nogle tidspunkter end andre (svarende til f.eks. våd og tør periode). Det er vigtigt at præsentere, hvor/hvornår modellen giver nøjagtige resultater, og specielt hvor/hvornår der er problemer. Det er muligt, at de upræcise resultater optræder i områder eller som følge af hydrologiske input, som det er mindre vigtigt at få beskrevet af modellen i forhold til det aktuelle formål med arbejdet. På trods af relativt store afvigelser mellem observationer og

simuleringsresultater, kan modellen derfor være troværdig til løsning af det aktuelle problem, hvorimod den ikke nødvendigvis vil være det til andre formål.

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

Dårlige resultater i valideringen vil afdække eventuelle problemer med modellens prediktive evner (se kapitel 15). I de tilfælde, hvor kalibreringsfasen gav god overensstemmelse mellem observationer og modellsimuleringer, vil problemer med valideringsresultatet eller troværdigheden af parameterestimaterne primært kunne tilskrives to faktorer: (1) Der kan være problemer med overparametrisering (se kapitel 4 og 15). Der er derfor grund til at forenkle den formulerede model og rekalkibrere modellen (eventuelt med et dårligere kalibreringsresultat til følge). (2) Det kan være et udtryk for, at kvantiteten og/eller kvaliteten af datagrundlaget, hvorpå kalibreringen fandt sted, var for ringe. Det vil derfor være relevant at indsamle yderligere data, hvis kravene til modellens præstationer skal bibeholdes. I modsat fald er det nødvendigt at acceptere, at modellens pålidelighed vil være begrænset.

16.4 MODELANVENDELSE

16.4.1 *Typer af tilstandsvariable, der kan simuleres*

Nøjagtigheden, hvormed en given type tilstandsvariabel forventes at kunne simuleres af modellen, afhænger i høj grad af, hvilke observationstyper, der indgik i kalibrering og validering, samt af, hvor godt observationsdata blev simuleret i de to faser. Hvis f.eks. observationer af hydraulisk trykniveau indgik i kalibreringen af modellen, og de opstillede kalibreringskriterier blev opfyldt for denne datatype, vil det kunne forventes, at foruden trykniveauet vil fluxen gennem reservoiret (jvnf. Darcys lov, lign. 5.6) kunne predikteres med en rimelig nøjagtighed. Til gengæld vil det være svært at vurdere, hvor godt modellen vil kunne simulere f.eks. strømningshastighed og stoftransport. Dels kan der rejses tvivl om, hvorvidt de effektive parametre, der repræsenterer Darcys lov, også er optimale i forbindelse med transportberegninger. Dels vil den effektive porøsitet være ukendt. Det skal derfor beskrives, hvor præcist det vurderes, at relevante tilstandsvariable kan forudsiges af modellen, og det skal præciseres, hvilke typer anvendelse modellen er valideret til.

16.4.2 *Skala hvorpå modellen arbejder*

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

Andre variable vil være repræsenteret på forskellige skalaer, og det vil derfor være hensigtsmæssigt at kvantificere, på hvilken skala de simulerede værdier kan repræsentere målte værdier. F.eks. vil nøjagtigheden, hvormed grundvandstilstrømning til vandløb kan bestemmes, være en funktion af oplandsstørrelsen i forhold til cellestørrelsen (jvnf. afsnit 12.4.2). Modellen skal derfor ikke forventes at kunne beskrive eksempelvis ændringer i minimumsvandføring for vandløbsstræk-

ninger med et lille opland (i forhold til cellestørrelsen). I DK-model Fyn (Henriksen et al., 1997) vurderes det, at oplandet skal have en størrelse på mindst 50 km², for at modellen kan simulere vandudvekslingen med acceptabel nøjagtighed (cellestørrelse på 1 km²).

16.4.3 *Hvilken type modellering kan modellen anvendes til?*

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

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

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

Hvis modellen også skal kunne bruges til at kvantificere, hvilke konsekvenser alternative indgreb i systemet vil have (beslutningsværktøj), bliver kravene til modellen yderligere skærpet. Dels skal modellen være robust overfor de påtænkte indgreb (jvnf. diskussionen af procesbeskrivelser og randbetingelser i afsnit 16.2.1 og 16.2.3). Dels vil en vurdering af modellens anvendelighed til dette formål afhænge af, hvilke typer af naturlige og menneskeskabte påvirkninger, den har været udsat for i kalibrerings- og valideringsfasen. Det vil eksempelvis være en fordel, hvis der har været inkluderet meget våde eller tørre perioder, eller hvis prøvepumpningsforsøg alternativt nye boringer/kildepladser er med i kalibrerings- eller valideringsperioden. Af andre påvirkninger, som det vil være fordelagtigt at inddrage, kan nævnes ændringer i arealanvendelse, kunstig vanding, dræning og vandbygningsværker (diger, dæmninger og andre konstruktioner).

16.5 *REFERENCER*

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

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