

Kapitel 2 FORMÅLET MED OPSTILLING AF MODEL

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

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

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

2.1 HVORDAN KAN MODELLER ANVENDES I FORBINDELSE MED ZONERING?

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

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

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

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

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

Indvindingsoplande og infiltrationsområder kan beregnes vha. partikelbanemodeller i forlængelse af strømningssmodelberegninger (se kapitel 18). Konkret sker dette ved at finde ud af, hvor partiklerne stammer fra, se f.eks. Refsgaard (1998), Refsgaard et al. (1997) og Henriksen et al.

(1997). Tilsvarende kan partikelbanemodellerne anvendes til at beregne hastighederne af vandpartiklerne og herudfra bestemme alderen af det grundvand, som pumpes op ved kildepladserne. Endvidere kan partikelbanemodellerne anvendes til at beregne transporttider igennem f.eks. øvre dæklag i mættet zone.

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

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

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

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

Tabel 2.1 Modeltyper og output

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

2.2 BRUG AF MODEL SOM FORTOLKNINGSVÆRKTØJ

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

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

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

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

2.3 BRUG AF MODEL SOM PROGNOSEVÆRKTØJ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Kvantificering af usikkerheden er efterhånden blevet et krav i enhver modellering, så det er tit relevant at inddrage invers modellering/parameterestimering, Peck et al. (1988), til at analysere hvilke parametre der er særligt følsomme eller hvilke områder der er særligt usikker simulering. Derudover kan behov for yderligere observationer ("targets") evt. analyseres. Ved invers modellering anvendes et hjælpeprogram til at justere parameterværdier i modellen og styre generering af modelsetup, afvikling af kørsler samt udtræk af resultater (f.eks. PEST eller UCODE, se kapitel 14).

Modelløren definerer på forhånd hvilke parametre, der skal estimeres, samt evt. nogle intervaller som er acceptable. Det vil herigennem være muligt dels at få estimeret de parameterkombinationer, som giver den bedste overensstemmelse i forhold til observerede trykniveauer og afstrømninger til vandløb, dels at få beregnet usikkerheder på parametre og dermed en vurdering af hvilke parametre, som er specielt vigtige at have viden om.

Egentlige usikkerhedsanalyser kan foretages ved en række stokastiske metoder, f.eks. Monte Carlo metoden (Freeze et al., 1990), se kapitel 19. Peck et al. (1988) påpeger, at Monte Carlo metoden muligvis er den stærkeste metode til usikkerhedsvurdering, idet denne metode er baseret på færre antagelser end andre metoder, er let at forstå, let at implementere og meget generel. Metoden er dog beregningstung og kræver et stort antal simuleringer. På baggrund af antagelser om fordelingsfunktionen af fx hydraulisk ledningsevne, genereres ved hjælp af geostatistiske metoder og målinger af ledningsevnen et stort antal realisationer af fordelingen af hydraulisk ledningsevne i et modelområde. Hver af disse realisationer gennemregnes efterfølgende og det samlede resultat analyseres med henblik på fastlæggelse af usikkerheder på fx simuleret trykniveau, nedsivning, partikelbaner eller stoftransport (Ruskauff, 1998).

Sammenfattende er der ved zonerings primært behov for følgende modelanalyser:

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

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

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

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

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

- Multikriterie metoder
- Statistiske metoder

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

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

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

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

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

2.6 REFERENCER

Aller, L.T., Bennet, T., Lehr, J.H., & Petty, R.J. (1987) DRASTIC: A Standardized System for Evaluating Ground Water Pollution Potential Using Hydrogeologic Setting, U.S. EPA Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, EPA/600/287/035, Ada, OK.

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

ASTM, D 6030-96 (1997) Standard guide for selection of methods for assessing groundwater or aquifer sensitivity and vulnerability.

Brown, D.M. (1992) The fidelity fallacy, *Ground Water*, Vol. 30, No. 4, 1992.

Freeze, R., Massmann, J., Smith, L., Sperling, T. & James, B. (1990) Hydrogeological decision analysis: 1. A framework, *Ground Water*, v. 28, no.5.

Hearne, G.A., Wireman, M. Campbell, A., Turner, S. & Ingersoll, G.P. (1995) Vulnerability of the Uppermost Ground Water to Contamination in the Greater Denver Area, Colorado, *U.S. Geological Survey Water Resources Investigations Report* 92-4143.

Henriksen, H.J., Rasmussen, P. & Knudby, C. (2000) Afprøvning af zoneringsmetoder, Miljøstyrelsen. Foreløbigt tryk. GEUS 1997 (publiceres elektronisk af Miljøstyrelsen medio 2000).

Peck, A., Gorelick, S., de Marsily, G., Foster, S. & Kovalevsky, V. (1988) Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice. IAHS Publication No. 175. A contribution to the International Hydrological Programme of UNESCO (IHP III; project 2.4d). 1988.

Refsgaard, A., Gregersen, J., Butts, M. & Kristensen, M. (1997) Indvindingsoplande og særlige drikkevandsområder, *Vand & Jord*, 4. årgang, nr. 3. juni.

Refsgaard, A. (1998) Grundvandets sårbarhed - Edb-modellering. *Vandforsyningsteknik* 47. Danske Vandværkers Forening.

Ruskauff, G.J. (1998) Guide to using Stochastic MODFLOW for Monte Carlo Simulation. ESI.