

Kapitel 20 RAPPORTERING AF MODEL OG RESULTATER

Hans Jørgen Henriksen
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Modelrapport, executive summary, modelabstract, modelarkivering, modelteknisk approach, hydrogeologisk tolkningsmodel, modelstudieplan og kalibreringsjournal.

ABSTRACT: I forbindelse med et omfattende modelarbejde anbefales det at der udarbejdes en standardiseret modelrapport, executive summary, modelabstract og foretages arkivering af modelsetup med indberetning til landsdækkende model metadatabase. Modelrapporten skal klart dokumentere omfanget af den nuværende systemforståelse, kalibrerings- og valideringsresultatet, betydning af usikkerheder på input, parametre, processer og konceptuel model for simuleringresultater og evt. forslag til videre arbejde. Resultater af eksterne reviews bør også klart fremgå.

20.1 INDLEDNING

I forbindelse med afslutningen af et modelarbejde skal der udarbejdes en rapport som beskriver såvel processen som resultaterne. I forbindelse med overslagsberegning/screening vil det ikke altid være relevant at udarbejde en systematisk modelrapport, med et indhold som beskrevet i dette kapitel. Men i forbindelse med detailmodellering (akvifer simulering / "hi fi") er det nødvendigt, at der udarbejdes en modelrapport, så man evt. kan arbejde videre med modellen på et senere tidspunkt, og så brugere af modellens resultater har mulighed for hurtigt at sætte sig ind i det faglige grundlag for modellens resultater.

Der anbefales i forbindelse med en detailmodellering ("high fidelity modellering") at udarbejde følgende hovedtyper på dokumentation i forbindelse med et grundvandsmodelarbejde:

Modelrapport: En faglig rapport der følger en "standarddisposition" til rekvirenten som beskriver grundlaget for modelarbejdet, formål, konceptuel model, valg af kode, modelopstilling, nøjagtighedskriterier, kalibrering, validering, usikkerhedsvurderinger, resultater af simuleringer, konklusioner og anbefalinger.

"Executive summary": En beskrivelse af modelsimuleringer og resultater heraf – indgår ofte som en del af en projekt hovedrapport og indgår også oftest som et eller flere afsnit i modelrapporten; her nævnt særskilt fordi man i forbindelse med "overslagsberegning" kun udarbejder et executive summary og ikke en standardiseret modelrapport.

"Modelabstract": Et 2 siders abstract der meget kortfattet afgrænser indhold, substans og essens i et modelarbejde struktureret jf. modelprotokol (bør også indgå i modelrapport som et appendiks eller udarbejdes særskilt i forbindelse med overslagsmodelleringer, hvor der ikke udarbejdes en standardiseret modelrapport).

Modelarkivering: Indberetning af modelsetupfiler og dokumentationsmateriale til landsdækkende modeldatabase (www metadatabase med abstracts, links mm.) fx på CD-rom eller lignende, som bør indeholde en kombination af modeljournaler, præ- og postprocesserings dataanalyser, modeldatafiler, så modellen kan "regenereres" (køres igen på senere tidspunkt), eller indgå som grundlag for opdatering af DK-modellen (www.vandmodel.dk).

Punkt 3 og 4 beskrives nærmere i kapitel 21. Executive summary skal ikke nærmere beskrives her. Der er tale om et dokument som i forvejen udarbejdes i stort set alle projekter, hvor der indgår modeller, og der er ikke behov for at standardisere executive summary.

Der har i Danmark ikke været tradition for udarbejdelse af en standardiseret modelrapport og i mange projekter foreligger der slet ikke nogen egentlig modelrapport, men kun en præsentation af simuleringsresultater. Det vurderes imidlertid stærkt påkrævet at ændre på denne praksis i forbindelse med den modellering, der udføres omkring detailkortlægning og zonerings. Dels er der behov for, at resultaterne af forskellige modelarbejder bliver gjort mere gennemskuelige for en lang række interessenter, dvs. at samtlige trin i modelprotokollen beskrives efter en standardiseret disposition. Erfaringer i forbindelse med fx vandmiljørapportering viser således, at en standardiseret rapportering er en fordel for alle parter.

Modelrapporten skal klart kommunikere omfanget af den nuværende systemforståelse, kalibrerings- og valideringsresultatet, betydning af usikkerheder på input, parametre, processer og konceptuel model for simuleringsresultater og evt. forslag til videre arbejde. Resultater af eksterne reviews i forbindelse med konceptuel model, kalibrering, validering mm. bør også klart fremgå.

Modelrapportering (fx notater eller delrapporter) er påkrævede på forskellige trin under udvikling af den samlede model: efter konceptualisering, kalibrering og simulering, og også i forbindelse med senere forfining eller udbygning af modellen. Rapporterne ved disse milepæle giver mulighed for tekniske reviews og det er vigtigt, at modelrapporter beskriver begrænsninger i modellen, og påpeger mulige løsningsmetoder, som kan anvendes i efterfølgende dataindsamlingsprogrammer og i forbindelse med videreudvikling af analyser og model.

20.2 DISPOSITION FOR STANDARDISERET MODELRAPPORT

Modelrapporten skal indeholde følgende (Henriksen et al., 1998; Middlemis, 2000; Harrar og Henriksen, 1996; Laase et al., 2000):

Rapporttitel	Vælg en titel der klart og tydeligt kommunikere projektmål, formål, og resultater med modellen i stedet for en titel der blot afspejler at der er opstillet en model for et givent område. Titelblad bør udover en præcis titel indeholde tidspunkt for publicering (fx marts 2000), navn på rekvirent incl. specifik afdeling (evt. flere), navn på rådgivningsfirma/institution der udfører modelleringen (incl. navne på de personer der står bag modelarbejdet fra disse firmaer). Omfang 1 side.
Indholdsfortegnelse incl. særskilt figurliste, tabelliste og acronymliste	Indholdsfortegnelsen skal være standardiseret jf. punkter beskrevet nedenfor i denne tabel og skal indeholde en liste over bilag eller appendiks. Derudover bør der udarbejdes en selvstændig figurliste, tabelliste og en liste med acronymer (og benyttede forkortelser i rapporten). Min. 4 sider (start på ny side ved figur-, tabel- og acronymliste).
Kapitel 1. Executive summary	En opsummering af modelopstilling, vurderede management scenarier, og resultaterne af modelarbejdet. En kort beskrivelse af hvordan modellen er blevet udviklet og detaljeret. Sammenfatning vedr. usikkerheder og begrænsninger i modellen og forslag til fremtidig løsning af disse problemer (fx dataindsamling eller yderligere modeludvikling). Omfang ca. 1 side (evt. mere).
Kapitel 2. Introduktion	Beskrivelse af projektformål, modelformål, og krav til modelnøjagtighed i specifikke og kvantificerbare størrelser. Introduktion til modelområdet og tidligere undersøgelser i området, og beskrivelse af vandressource aspekter som der rettes særlig fokus på i området (hvilket trin i zonerings arbejdet der på, skal modellen give input til detailkortlægning eller benyttes til kvalitetssikring af indsamlede data og konklusioner). Hvis modellen benyttes i en af de senere faser, hvilke indsatsplaner og vandressourceproblemer er der for området). Omfang ca. 4 sider (incl. en figur der viser modelområdet).

<p>Kapitel 3. Teknisk "approach"</p>	<p>Her gives en beskrivelse af modelbenyttelsen og den metodik der er benyttet (incl. relevante referencer). Hvis der benyttes en integreret hydrologisk model beskrives forskellige input til denne fx klimadata, arealanvendelses- og vandindvindingsdata ligesom output beskrives. Hvilke dele af vandkredsløbet er inddraget og hvorfor? Hvilke koder er anvendt og hvorfor (strømningsmodel, partikelbanemodel og evt. stoftransportmodel)? Hvis der er inddraget parameter estimering (fx invers modellering), optimering, Monte Carlo metodik og evt. økonomiske risikoanalyser bør principperne bag hver enkelt af disse metoder incl. referencer beskrives og gør rede for, hvordan de anvendes som delelementer i det samlede modelarbejde. Er det valgt at arbejde med en enkelt konceptuel model eller er der benyttet alternative modeller? Omfang ca. 4 sider.</p>
<p>Kapitel 4. Dataanalyse, geologisk karakterisering, opstilling af hydrogeologisk tolkningsmodel</p> <p><i>(en del af dette kan med fordel ligge i appendiks eller udgøre en selvstændig datarapport)</i></p>	<p>Detaljeret information omkring den hydrogeologiske tolkningsmodel og tilhørende hydrauliske parametre for vandførende og lavpermeable lag incl. estimater af vandbalanceforhold. Kapitlet struktureres i følgende afsnit med stor vægt på visuel præsentation på figurer:</p> <p><u>4.1 Geologisk model:</u> (a) regional geologi, (b) stratigrafi for kvartæret, miocæne aflejringer og evt. ældre lag fx kalk, (c) specielle heterogenitetsforhold med vægt på sprækker og sandvinduer som følge af glacial-tektoniske variabilitet og tektoniske forhold, forkastninger i kalk mm., (d) analyser på baggrund af detaljerede kortlægninger ved hjælp af overfladegeofysik, borehulslogging, seismik eller georadar. Præsentation på figurer af 3D geologisk model fx ved hjælp af geologiske profiler eller "fence diagrammer", tolkede geologiske laggrænskort, udbredelse, top og bund af linser, prækvartæroverfladen, samt oversigts kort med datagrundlag/boringer mm.)</p> <p><u>4.2 Grundvandssystemet:</u> (a) Antagelser om reservoirforhold, heterogenitet og præsentation af valgt hydrostratigrafisk model. De enkelte lag i den hydrostratigrafiske model beskrives incl. antagelser om hydraulisk ledningsevne mm. Der udarbejdes tykkelseskort for de enkelte lag som præsenteres i rapporten. (b) Såfremt der er udarbejdet mere detaljerede konceptuelle modeller fx for de øverste morænelerslag beskrives disse i tekst og figurer.</p> <p><u>4.3 Hydrologiske afgrænsninger:</u> (ydre og indre randbetingelser). (a) Randbetingelser i form af modeloverflade, dræn og vandløb beskrives. (b) Ydre randbetingelser langs modelrand beskrives. (c) Fastlæggelse af modelbund (fx impermeabel bund).</p> <p><u>4.4 Hydrauliske størrelser:</u> (a) A-priori parameterværdi for hydraulisk ledningsevne intervaller (horisontal og vertikal) for de enkelte geologiske typer beskrives på baggrund af prøvepumpningsanalyser, slug-tests eller erfaringsværdier fra andre områder. (b) Magasinkoefficienter og -tal beskrives. (c) Lækagekoefficienter for fx vandudveksling mellem grundvand og vandløb/søer beskrives.</p> <p><u>4.5 Ind- og udstrømning/vandbalancen:</u> (a) Tidslig og rumlig variation i nedbør og fordampning indenfor modelområdet beskrives incl. datagrundlag og metoder. (b) Tidslig og rumlig variation i afstrømningsforhold indenfor modelområdet beskrives. (c) Beskrivelse af nettonedbørens variation i tid og rum og antagelser vedr. fordeling af nettonedbør mellem grundvand og overfladevand, evt. bypass-flow osv. (d) Øvrige "kilder" til grundvandsdannelse i området fx infiltrationsbasiner, nedsvivning langs forsyningsledninger mm., (e) Vandind-</p>

	<p>vinding til vandforsyning, markvanding og industri i området. (f) Grundvandsafstrømning til vandløb (fx ud fra synkronmålinger) og anden interaktion mellem overfladevand og grundvand, (g) Grundvandspotentialerforhold og tidlige variationer i trykniveau ud fra pejle-tidsserier. Hvis vandspejl i overfladevand har relevans beskrives disse. (h) Vandbalance for modelområdet med samtlige input og output.</p> <p><u>4.6 Vandkvalitetsforhold:</u> (a) Beskriv naturlige vandkvalitetsforhold på udvalgte profilsnit, fx ved vandtype, redoxmiljø og nitratinhold eller i form af kort over de enkelte hydrostratigrafiske lag/grundvandsmagasiner</p> <p><u>4.7 Aldersdateringer:</u> Beskriv aldersbestemmelser ud fra tritium, CFC eller øvrige tracere i tabelform eller på profilsnit.</p> <p>Omfang: 20-40 sider heraf en stor del figurer og/eller tabeller.</p>
<p>Kapitel 5. Modelstudieplan</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Plan for håndtering af vandløb og søer, umættet zone, præferentiel strømning, densitetsforhold i modellen - Skitsering af afgrænsning af modelområde og diskretisering af mættet zone horisontalt og vertikalt - Forslag til simuleringsperiode og diskretisering i tid. - Plan for kalibrerings- og valideringsmetodik (nøjagtighedskrav) - Plan for usikkerheds- og sensitivitetsanalyser (herunder håndtering af usikkerhed på konceptuel model) - Tidsplan, milepæle og eksterne reviews - Begrundelse af valg af modelkode og præprocesser(-r) <p>Omfang 1-2 sider.</p>
<p>Kapitel 6. Modelopstilling</p>	<p>Beskrivelse af modelområde, diskretisering, hydrauliske parametre, input- og output til vandbalancen, randbetingelser og valg af kalibreringsmål/nøjagtighedskrav.</p> <p><u>6.1 Afgrænsning af modelområdet.</u> Beskriv UTM koordinater for modelområdet og diskretisering horisontalt og vertikalt af beregningslag.</p> <p><u>6.2 Randbetingelser.</u> Vis ydre randbetingelser på figur og beskriv valget. Beskriv hvilke indre randbetingelser der er anvendt og vist placering af dræn-, vandløb-, søer, hav mv. på kort, herunder en evt. a-priori distribuering af lækagekoefficienter for fx vandløb.</p> <p><u>6.3 Zonering af hydrauliske ledningsevner.</u> Begrund zoneringer på baggrund af geologi eller prøvepumpningsresultater og vis fordelinger på et kort af fx hydrauliske ledningsevner som distribueres over modelområdet. Præsenter konstante værdier i tabelform. Angiv et startgæt og en realistisk variationsramme for hver parameter i modellen, som forventes at skulle indgå i kalibreringen.</p> <p><u>6.4 Zonering af grundvandsdannelsen.</u> Præsenter den anvendte zone-ring af grundvandsdannelsen hvad enten denne er baseret på et eksternt modul eller er en del af den hydrologiske model i et antal grundvandsdannelsesklasser. Angiv et startgæt og realistiske variationsrammer for hver zone ud fra en analyse af datagrundlaget.</p> <p><u>6.5 Præsenter evt. alternative konceptuelle modeller,</u> såfremt det er valgt at arbejde med mere end en model.</p> <p><u>6.6 Numeriske parametre,</u> beskriv de benyttede konvergenskriterier, tidsskridt og de øvrige numeriske parametre, der indgår i den benyttede kode/"solver"</p> <p>Omfang: 10-20 sider.</p>

<p>Kapitel 7 Kalibrering</p>	<p>Beskrivelse af kvantitative kalibreringsmål (targets), kvalitative mål og resultater af kalibrering og sensitivitetsanalyser</p> <p><i>7.1 Beskriv den anvendte kalibreringsmetodik og anvendte kvantitative og kvalitative kriterier.</i> Statistiske krav til residualafvigelse i forhold til trykniveau (fx RMS), flow (fx R^2) og kvalitative krav til vurdering i forhold til potentialebilleder, afstrømningshydrografer og fx vandkvalitetsdata. Brug af trial-and-error, invers metodik, sensitivitetsanalyser mm.</p> <p><i>7.2 Kalibreringsmål (targets).</i> Præsenter en liste med de targets (fx pejleboringer, vandføringsmålestationer) der anvendes til kalibrering og targets som planlægges benyttet til modelvalideringen. For hver udvalgt trykniveautarget angives trykniveau, der benyttes i forbindelse med stationær kalibrering, og vægtfaktor (synkronpejlinger vægtes mere end fx PC Jupiter data). Fluxtargets udvælges for delstrækninger ud fra synkronmålingsresultater og præsenteres ligeledes med en vægtfaktor. Derudover angives UTM koordinater, beregningslag (eller kote for filtermidtpunkt) for samtlige trykniveau- og fluxtargets i tabelform/bilag). Der præsenteres en figur der viser hvilke delstrækninger data er organiseret i forhold til (fluxtargets altså ”reaches”). Targets der benyttes til transient kalibrering og evt. reserveres til validering beskrives med placering på kort og i tabelform.</p> <p><i>7.3 Kalibreringsjournal.</i> Der foretages en beskrivelse i tabelform af udvalgte kørsler hvor der er ændret væsentligt på den konceptuelle model eller modelopstilling, zonerings af parameterværdier o.l. Beskrives i tabelform med: Nr., Titel på kørsel, modelændring i forhold til tidligere version, kommentering af resultater i forhold til kalibreringsmål.</p> <p><i>7.4 Kalibreringsresultat.</i> Kalibreringsresultatet præsenteres i form af:</p> <ul style="list-style-type: none"> (a) vandbalance, incl. tidsserier for udvalgte komponenter og årlige massebalancer for model som helhed og enkelte modellag (b) massebalancefejl (numerisk løsning, konvergenskriterium) (c) præsentation af residualværdier af trykniveau og fluxer på kort, scatterplot og kalibreringsresultat i forhold til statistiske mål (fx RMS, R^2 o.l.) (d) sammenligning af simuleret og modelleret trykniveau (vises på kort, profiler, hydrografer og ved horisontale og vertikale gradienter) (e) sammenligning af simuleret og modelleret udveksling mellem grundvand og overfladevand (vandløbshydrografer, vandbalance-diagrammer mm.) <p><i>7.5 Resultater af sensitivitetsanalyser og invers modellering</i> Beskriv de kalibrerede parametre i tabelform. Angiv de mest følsomme parametre for anvendelse af modellen. Angiv hvilke parametre der evt. er foretaget invers kalibrering af og resultater heraf med hensyn til estimerede variationsintervaller, estimerede 95 % konfidensgrænser, resultater af korrelationsmatricer (korrelerede parametre) mm. Omfang: 20-40 sider (en stor del tabeller og figurer).</p>
<p>Kapitel 8. Modelvalidering</p>	<p>Angiv metoden og resultatet af modelvalideringen ud fra split-sample test, proxy-basin test eller differential split-sample test (evt. kombination af forskellige metoder).</p> <p><i>8.1 Valideringsmetode</i> (stationær og dynamisk model)</p> <p><i>8.2 Kvantitativ bedømmelse af valideringstesten</i> Præsenter statistiske</p>

	<p>kalibreringsmål for valideringsdatasættet sammenlignet med kalibreringsresultatet på baggrund af valideringstargets og residualværdianalyse.</p> <p><u>8.3 Semi-kvantitativ/kvalitativ vurdering af valideringen.</u> Præsenterer tidsserier for valideringsperioden af simuleret og målt vandføring og trykniveau, samt kort over simuleret og målt trykniveau med henblik på kvalitative vurderinger af valideringsresultatet.</p> <p><u>8.4 Alternative parametre.</u> Resultater af vandkvalitet, aldersdateringer og evt. forureningsspredning fra punktkilder sammenlignes med fx modelleret aldersfordeling og forureningsudbredelse beregnet med stoftransportmodel eller partikelbanemodel</p> <p><u>8.5 Sammenligning i forhold til tidligere modeller for området.</u> Hvis der foreligger andre modeller for området kan der evt. foretages en sammenligning af resultat, såfremt tidligere modeller er velkalibrerede og -validerede.</p> <p>Omfang: 5-10 sider.</p>
Kapitel 9. Begrænsninger i modellen	<p>Usikkerheder og svagheder i modellen i forhold til den konceptuelle model, diskretisering, erfaringer fra modelkalibrering, validering og simuleringer sammenfattes og forslag til løsninger beskrives med hensyn til såvel dataindsamling som fremtidig modeludvikling.</p> <p>Omfang 1-2 sider.</p>
Kapitel 10. Modelsimulering incl. usikkerhedsanalyser	<p>Resultater af de valgte simuleringsscenarier beskrives i forhold til valgt basis-case. Vurdering af usikkerheder på simuleringresultater.</p> <p><u>10.1 Præsentation af referencekørsel.</u> Trykniveau, afstrømningsforhold, nettonedbør, grundvandsdannelse til forskellige magasiner, grundvandsdannende oplande til vandværker og vandbalanceforhold præsenteres for basis case på kort og tidsserier. Præsentation af ændringer i øvrige simuleringsscenarier vises evt. i form af afvigelser fra basis-case fx ændret vandføring, afsækning mm.</p> <p><u>10.2 Fastlagte simuleringsscenarier.</u> Præsenteres i tabelform og på figurer. Processerede tidsserier til brug for scenarierne præsenteres (fx klima, oppumpning mm.).</p> <p><u>10.3 Resultater af simuleringsscenarier.</u> Grundvandsdannelsen præsenteres udfra stationære og/eller transiente simuleringer i form af kumulative sandsynlighedsfordelinger for modelområdet som helhed eller kort der viser resultater for sandsynligheder på 0.1, 0.5 og 0.9, således at usikkerheder på input og parameterverdier indbygges i resultaterne. Partikelbaner beskrives dels deterministisk (best estimate) men der udarbejdes desuden plot af variationsrammer når usikkerhed på input og udvalgte parameterverdier inddrages.</p> <p>Omfang: 15-50 sider (meget afhængigt af opgavetypen).</p>
Kapitel 11. Konklusioner og anbefalinger	<p>Resultaterne af modelarbejdet sammenfattes. Anbefalinger vedr. management scenarier og andre resultater af modelarbejdet beskrives.</p> <p>Omfang: 1 side.</p>
Kapitel 12. Referencer	<p>Der udarbejdes en referenceliste med relevant litteratur.</p> <p>Omfang: 2 sider.</p>
Appendiks og bilag	<p>Så meget som muligt af den detaljerede information præsenteres i appendiks eller bilagsform, således at læsbarheden af rapporten er så god som muligt (ovenstående sideangivelser er incl. bilag).</p>

20.3 REFERENCER

Harrar, W.G. og Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted å. Aquifer System: setup and calibration. Rekvirent Esbjerg kommune, forsyningsvirksomhederne og Ribe amtskommune. Marts 1996.

Henriksen, H.J., Troldborg, L.T., Knudby, C.J., Dahl, M., Nygaard, P., Jakobsen, P.R. og Rasmussen, P. (1998) National Vandressource Model. Sjælland, Lolland, Falster og Møn. GEUS rapport 1998/109. www.vandmodel.dk

Laase, A.D., Rumbaugh, J.O. and Anderman, E.A. (2000) Design, optimization and evaluation of the Kansas city plant interception system. Report prepared by Oak Ridge National Laboratory, Grand Junction, Colorado for Environmental Restoration Program at the Kansas City Plant, U.S. Department of Energy. Kansas City, Missouri. February 2000.

Middlemis, H. (2000) Draft groundwater flow modelling guideline. Murray-Darling Basin Commission. Aquaterra Consulting Pty Ltd. Western Australia. Project No. 125. July 2000.