

Kapitel 6 FRA HYDROGEOLOGISK TOLKNINGSMODEL TIL NUMERISK GRUNDEVANDSMODEL

Adam Brun
IHA – Ingeniørhøjskolen i Århus

Nøglebegreber: Kode, præ- og postprocessering, procesbeskrivelse, numerisk net, numerisk model, fysisk model

ABSTRACT: Det er vigtigt at vælge en kode, der dels indeholder den ønskede beskrivelse af processerne, dels faciliterer en effektiv indlæggelse af data. Afhængigt af procesbeskrivelsen vil der være forskellige krav til informationstypen og -mængden samt til den valgte kode. Arbejdet med denne store datamængde kræver tilpassede værktøjer, såkaldte præ- og postprocessorer. En præprocessor automatiserer overgangen fra den hydrogeologiske tolkningsmodel til den numeriske model. Den numeriske model indeholder alle de informationer, der danner baggrund for en egentlig beregning af grundvandsstrømningen med en specifik kode.

6.1 VALG AF KODE

Ved valget af kode er der mange forskellige elementer, der spiller ind, og de vil vægtes forskelligt afhængigt af, hvem der inddrages i beslutningsprocessen. I delvist prioriteret rækkefølge kan følgende elementer inddrages:

- Procesbeskrivelsen, herunder mulige randbetingelser. Randbetingelser er sammenhængende med procesbeskrivelsen, idet nogle processer, eksempelvis udveksling med vandløb og op-pumpning, indbygges som randbetingelser.
- Mulighed for automatisk at indbygge hydrogeologiske egenskaber ud fra en rumlig opfattelse af hydrogeologien, et meget væsentligt element i præprocesseringen.
- Mulighed for invers modellering samt anden form for parameterestimering.
- Kvalitet af dokumentation, herunder verifikation af koden, manualer og lignende.
- Mulighed for erfaringsudveksling med andre brugere, support fra kodeudvikleren.
- Fremtidsudsigter for koden, herunder hvilken mulighed der er for at skifte til andre koder uden alt for stort tab af arbejdsindsats.
- Hvordan er den at arbejde med, hvordan er mulighederne for at automatisere trivielle opgaver, såsom opdatering af hydrogeologien, plotning af indvindingsoplande, mulighed for integration i GIS systemer osv.

I den følgende diskussion vil der blive refereret til forskelle koder. Der diskuteres kun koder, der er lavet til at blive distribueret bredt, dvs. som har en vis kompatibilitet med hjælpeprogrammer og generelle metodikker. Med kode menes der i denne sammenhæng et selvstændigt program, der umiddelbart kan afvikles på en normal computer uden installation af specielle programmer. Der nævnes forskellige koder undervejs, alle disse opsummeres i slutningen af dette kapitel.

6.1.1 Procesbeskrivelsen

Valget af kode hænger selvsagt meget sammen med den hydrogeologiske tolkningsmodel, der er valgt. Omvendt er det nødvendigt at skele til, hvilke koder der er tilgængelige i forbindelse med valget af hydrogeologisk tolkningsmodel. Typisk vil valget af en specifik kode medføre, at en del af det hydrologiske kredsløb beskrives meget detaljeret på bekostning af de andre dele i kredsløbet.

I forbindelse med arbejdet med zoneringsarbejdet er det i første omgang valgt at fokusere på en tre-dimensional beskrivelse af ikke-stationær grundvandsstrømning påvirket af umættet zone, grundvandsindvinding samt udveksling med vandløb. For at kunne arbejde med koden specifikt i forbindelse med zoneringsarbejdet er det ligeledes nødvendigt at kunne anvende resultatet fra strømningeberegningerne i en efterfølgende partikelbaneberegning.

Umættet zone

Samspillet mellem umættet zone og grundvandszonen inkluderes typisk via en randbetingelse, der specificerer, hvor meget vand der strømmer ind i toppen af modellen. Denne vandbevægelse kaldes perkolation eller grundvandsdannelse. Ved at lade denne randbetingelse være tids- og stedsafhængig kan man simulere variationerne i grundvandsdannelsen. Ved denne simplifikation mister man en dynamisk beskrivelse af, hvad der sker i den umættede zone over grundvandsspejlet. Valget af denne procesbeskrivelse vil derfor kræve, at den effektive perkolation bestemmes eksplicit ved hjælp af et andet værktøj. Disse værktøjer findes, eksempelvis DAISY, men er ikke diskuteret nærmere i dette dokument.

Stort set alle grundvandskoder inkluderer muligheden for en steds- og tidsvarierende strømning ind og ud af modeloverfladen. Der kan dog være begrænsninger i antallet af forskellige perkolationsområder, på den tidslige opløsning eller andet.

Hvis den umættede zone ønskes inkluderet dynamisk, indsnævrer feltet af tilgængelige koder sig. Koder, der inkluderer en fuld dynamisk kobling af umættet og mættet strømning med løsning af Richards ligning for umættet strømning horisontalt og vertikalt, vil typisk øge beregningstiden betragteligt, i nogle tilfælde til urealistiske værdier. Disse koder er derfor ikke så udbredt i forbindelse med oplandsskalamodellering.

Grundvandsindvinding

Stort set alle koder har mulighed for at inkludere indvindinger. Dette gøres typisk ved at udtage et givent flow fra givne beregningsceller. Brugeren skal således selv afgøre den vertikale fordeling af indstrømningen til en boring, der vertikalt strækker sig over flere beregningsceller. Nogle koder eksempelvis MODFLOW-SURFACT99 har dog mere sofistikerede beskrivelser, der dels kan fordele indstrømningen fra de enkelte celler ud fra hydrauliske egenskaber og dels dynamisk kan justere indvindingsmængden som funktion af, hvor stor en del af filtret der ligger under vandspejlet.

Udveksling med vandløb

Den mest simple måde at inkludere vandløb i beregningerne er at tilføje bidraget til perkolation. Man skal således for hver beregningscelle, der på overfladen er overlejret af et vandløb, korrigere perkolationen, således at den tidsvarierende ind- og udstrømning til vandløbet medregnes. Denne metodik kræver, at man som udgangspunkt kender/fastsætter ind- og udstrømningen. En anden lidt mere sofistikeret metode tager udgangspunkt i, at man kender vandstanden i vandløbet. Principielt kan udveksling med et vanddækket område beskrives med vandspejlsforskellen mellem vandløbet og grundvandet ganget en lækagekoefficient. Mange koder har mulighed for at indbygge vandløb på denne måde. Der skal til disse koder opgives vandspejl til alle de celler, som er delvist overlejret af vandløbet. Dette kan være et forholdsvis tidskrævende arbejde at bestemme disse koter og lægge dem ind som tids- og stedsvariable værdier. Metoden sikrer, at vandet strømmer henholdsvis ind og ud af vandløbet afhængigt af grundvandsstanden. Der er dog ingen kontrol af vandmængden i vandløbet, og der kan således udstrømme mere vand fra vandløbet til grundvandet, end der er til rådighed. Der er yderligere en mere avanceret beskrivelse, hvor der tages hensyn til vandløbets flow, se kapitel 7. To koder, MIKE SHE og MODBRANCH, har ud over denne udvekslingsbeskrivelse mulighed for at inkludere en dynamisk beskrivelse af strømningen i vandløbet, fuldt koblet med grundvandsstrømningen.

Udveksling med dræn

Indstrømning til dræn inkluderes typisk som en modstandsfunktion, nogenlunde svarende til vandløbsbeskrivelsen. MIKE SHE har yderligere mulighed for at lede vandet fra dræne til vandløbet, hvis der i modellen er valgt en dynamisk beregning af vandløbsstrømningen.

6.1.2 *Mulighed for partikelbanesimuleringer*

Stort set alle koder har mulighed for partikelbanesimuleringer efterfølgende flowberegningen.

6.1.3 *Mulighed for automatisk at indbygge hydrogeologiske egenskaber ud fra en rumlig opfattelse af hydrogeologien*

I forbindelse med opsætningen af modellen er der to væsentlige beslutninger, der skal tages. Hvordan skal man diskretisere, altså opdele ens fysiske område i mindre delområder, såkaldte beregningsceller, og hvordan har man tænkt sig at indlægge de stedsvariable parametre i disse beregningsceller? Beregningscelleantallet kan let overstige 10.000, så det er derfor meget vigtigt, at koden har en god og brugbar måde at håndtere dette på. Den geologiske model vil typisk blive håndteret af andre værktøjer end selve grundvandskoden. I forbindelse med zoneringsarbejdet er det forventet, at der løbende skal opdateres på den geologiske model. Det er derfor vigtigt, at en sådan ændring kan gennemføres med en så lille indsats som muligt. Det er derfor nødvendigt, at koden samt de tilhørende præ- og postprocesseringsværktøjer understøtter en effektiv metodik til overførsel af den geologiske model til parameterverdier i de enkelte celler i den numeriske model. Denne præprocessering behandles separat i et senere afsnit.

6.1.4 *Mulighed for invers modellering samt anden form for automatiseret parameterestimering*

Ved fastlæggelse af eksempelvis den hydrauliske ledningsevne vil man typisk som udgangspunkt bestemme værdien ud fra den geologiske formation, som beregningscellen består af. Den aktuelle værdi indlægges så ud fra erfaringsværdier eller ud fra egentlige forsøg foretaget ved den pågældende lokalitet. Dette vil ikke nødvendigvis resultere i en tilfredsstillende fordeling af den hydrauliske ledningsevne, modellen vil ikke kunne repræsentere virkeligheden på en tilfredsstillende måde. Derfor vil man påbegynde at kalibrere modellen ved at justere på parameterverdierne og gentage simuleringen, dette gøres trinvist, indtil modellen accepteres. Denne trinvis fremgangsmåde kan automatiseres, dette kaldes for invers modellering. Denne automatisering kan dels lede til bedre resultater og dels spare tid.

6.1.5 *Kvalitet af dokumentation, herunder verifikation af koden, manualer og lignende*

En komplet beskrivelse af en kode inkluderer både en egentlig gennemgang af de ligninger samt tilhørende numeriske løsningsmetoder, der er valgt, og en brugervejledning. Det er vigtigt at gennemgå disse materialer på forhånd og vurdere, om det er muligt at anvende koden til det ønskede formål alene ud fra disse materialer. Denne dokumentation vil også give et vist indtryk af den organisation, der står bag koden. Det er vanskeligt at starte fra bunden uden gode eksempler på modelopsætninger, der ligner det, man selv skal i gang med. Mange koder inkluderer derfor testeksempler. En del af den nødvendige dokumentation af koden er beskrivelsen af, hvorledes den er verificeret. Denne verifikationsproces sikrer, at koden rent faktisk regner på det givne ligningssystem med de givne randbetingelser.

6.1.6 *Mulighed for erfaringsudveksling med andre brugere, support fra kodeudvikleren*

Alle koder vil på et eller andet tidspunkt medføre, at en bruger vil have problemer med at gennemskue, hvordan koden håndterer en specifik problemstilling, eller hvordan man kontrollerer mere specielle funktioner. Det er derfor vigtigt at kunne udveksle erfaringer med andre brugere af samme kode. Det kan derfor anbefales at vælge en kode, hvor der er et godt forum for erfaringsudveksling, hvori det også er muligt at inddrage udvikleren af koden.

6.1.7 Fremtidsudsigter for koden, herunder hvilken mulighed der er for at skifte til andre koder uden alt for stort tab af arbejdsindsats

Koder opdateres jævnligt, nogle koder udgår helt, og andre kommer til. Det er derfor vigtigt ikke at "låse" sig til en specifik kode. Dette kan sikres ved at vælge koder, hvor integration med andre koder og filformater er mulig. Dette vil også sikre, at man ikke spilder arbejdet, hvis man starter med en kode med en simpel procesbeskrivelse, og senere ønsker at skifte til en kode, der har flere faciliteter.

6.1.8 Hvordan er den at arbejde med, hvordan er mulighederne for at automatisere trivielle opgaver, såsom opdatering af hydrogeologien, plotning af indvindingsoplunde, mulighed for integration i GIS systemer osv.

Til sidst skal det nævnes, at valget af én specifik kode også delvist vil medføre valg af præ- og postprocesseringsmuligheder. Vælg en kode, der faciliterer en god integration med de bestående værktøjer, det vil i denne sammenhæng sige, styresystemer, grafiske værktøjer, regneark osv.

6.1.9 Udbuddet

Udbuddet af grundvandsmodeller er stort. Tabel 6.1 beskriver en overordnet inddeling af koderne ud fra deres kobling af grundvandsstrømning med umættet zone og vandløb.

Tabel 6.1 Beskrivelse af overordnede muligheder

Type	Beskrivelse	Kode
A.	Grundvandsstrømning, indvinding*, infiltration*, dræn*, vandløb*	MODFLOW, MODFLOW-SURFACT, FEFLOW, MIKE SHE samt mange andre
B1	Type A med fuld kobling til umættet zone	MODFLOW-SURFACT, FEFLOW, MIKE SHE**
B2	Type A med fuld kobling til vandløb	MODBRANCH, MIKE SHE
C	Type A med fuld kobling til vandløb, umættet zone samt overfladeafstrømning	MIKE SHE**

* Som randbetingelse uden tilbagekobling

** Kun vertikal umættet strømning

Type A:

MODFLOW er nok den mest udbredte grundvandskode. MODFLOW er udviklet af USGS og kan erhverves både som kørbar kode og som kildetekst. MODFLOW er i sin grundform en finit-differensmodel med en kerne, som består af en grundvandskode. Den er modulært opbygget, således at det er nemt (for erfarne modellører) selv at inkorporere forskellige faciliteter. Der er lavet mange præ- og postprocesseringsmoduler til MODFLOW. Gratis-versionen hedder i øjeblikket MODFLOW2000. Den har i august 2000 erstattet den tidligere version fra 1996, MODFLOW96. MODFLOW2000 har i forhold til MODFLOW96 flere muligheder for parameter estimation, sensitivitetsanalyser samt stoftransport. MODFLOW2000 har ikke været anvendt så meget som MODFLOW96 endnu, og i det tilfælde, at denne anvendes kan det anbefales at være meget opmærksom på eventuelle meddelelser fra USGS. Der mange koder, der anvender algoritmerne i MODFLOW som basis. Et eksempel på dette er MODFLOW-SURFACT, der via supplerende moduler øger MODFLOW's virkeområde til også at omfatte umættet strømning, en sofistikeret brøndfunktion og andet. Typisk resulterer en sådan forøgelse i, at koden kun er kommercielt tilgængelig og kun i en kørbar version.

Type B1:

Disse koder har en fuld koblet beskrivelse af umættet zone og grundvandsstrømning. Tidsdynamikken i umættet zone er meget hurtig i forhold til grundvandet. Typisk vil tidskridtene ændres fra dage til minutter, ligeledes vil det kræve en finere stedlig diskretisering. Disse forhold vil resul-

tere i, at beregningerne tager meget lang tid, alternativt at der regnes på et mindre geografisk område. Type B1 modeller er derfor ikke som sådan beregnet til modellering på oplandsskala. MIKE SHE simplificerer dog den umættede beskrivelse, således at umættet strømning kun foregår i vertikal retning. På trods af denne forsimpning er beregningstidsforøgelsen dog stadig betragtelig. Inklusionen af en kobling med umættet zone medfører typisk en mere følsom model, med større sandsynlighed for numeriske fejl (division med 0 og lignende), der resulterer i, at beregningen afbrydes.

Type B2:

Denne type inkluderer en fuld kobling mellem grundvandszonen og vandløbssystemet. Vandløbssystemet har en meget mere dynamisk beskrivelse med tidshorisonter på minutter. Denne type koder er dog ganske stabile, idet koblingen mellem grundvandet og vandløbene ikke er så direkte som ved umættet zone, hvor grundvandet så at sige kan stige op i den umættede zone. De fleste vandløbskoder har dog svært ved at håndtere en situation, hvor vandløbet tørrer ud. MIKE SHE og MODBRANCH synes at være de eneste koder, der håndterer denne kobling, MODFLOW-SURFACT annoncerer, at det inkluderes i deres MODFLOW-SURFACT2000 version.

Type C:

MIKE SHE er i øjeblikket den eneste model, der inkluderer en fuld kobling mellem grundvand, vandløb og umættet zone. MIKE SHE er udviklet til modellering af hydrologi på oplandsskala, og den umættede zonebeskrivelse er derfor simplificeret for at undgå alt for lange beregningstider.

Prisen på en grundvandskode samt forskellige præ- og postprocesseringsværktøjer varierer meget, fra ingenting til DKK 40-50.000. Udgiften til koden er en meget begrænset del af den samlede udgift til zoneringsarbejdet og vil derfor ikke blive diskuteret nærmere (Se prisliste i afsnit om præ- og postprocessering).

6.2 VERIFICERING AF KODE

For de kommercielt tilgængelige koder gælder det, at der er gennemført verificeringskørsler. Disse er typisk afrapporteret i de medfølgende manualer. Generelt må det forventes, at ovennævnte koder er godt verificeret, det kan dog være en fordel løbende at holde øje med rapporter om fejl og uhensigtsmæssigheder. Disse kan typisk findes på hjemmesider på internettet. De fleste koder forhandles af mange forskellige udbydere, det kan være en fordel at finde frem til det sted, hvor koden er udviklet. Typisk vil der på dette sted kunne findes den bedste og mest opdaterede information om den specifikke kode.

6.3 PRÆPROCESSERING - OVERFØRSEL AF HYDROGEOLOGISKE PARAMETRE TIL MODELLEN

Når man arbejder med grundvandskoder og geologiske modeller, vil man typisk konstruere sin geologiske model i lag og linser ud fra informationer fra lagfølgeboringer, geofysiske undersøgelser og andet. Lag er i modelområdet kontinuerte geologiske enheder, der principielt består af den samme geologiske enhed. Linser er inden for modelområdet, diskontinuerte delområder. Disse kan gå på tværs af laggrænser, men har altså ikke en tilsvarende horisontal udbredelse.

Lag defineres ud fra en top- og en bundflade, der kan variere i stedet, således at laget kan have varierende tykkelse. I de fleste tilfælde skal lagene have en vis minimumstykkelse, 1-5 cm, for ikke at forvirre en automatiseret overførsel af informationer fra den geologiske model til grundvandsmodellen. Linser har tilsvarende en top og bund, men er yderligere defineret ud fra en horisontal udstrækning. Denne samling af lag og linser kaldes her den fysiske model. Typisk dannes den fysiske model ud fra optegning af geologiske tværsnit, se figur 6.1, øverst.

Der findes koder til denne proces, et dansk produkt GeoEditor kan således direkte fra boringsdatabasen Jupiter opstille fysiske modeller. Enkelte præprocessorer til specifikke koder har også denne funktionalitet. GMS og Visual Groundwater er eksempler på sådanne processorer. I andre

koder, ex. Groundwater Vistas, kan den geologiske model importeres i form af ”zoner” omfattende beregningslag, rumlig fordeling af hydrauliske parametre og andet, fra eksempelvis GIS-programmet ArcView.

For at kunne opstille en numerisk model kombineres den fysiske model med en overflademodel, se figur 6.1, nummer to fra toppen. Overflademodellen indeholder information om, hvordan den umættede zone, vandløb, indvindingsboringer med mere skal inkluderes. Ved en modelberegning er det nødvendigt at opdele den fysiske model i mindre enheder, såkaldte beregningsceller. Denne model kaldes her den numeriske model. Hver beregningscelle skal tilføres information om de hydrogeologiske egenskaber. Overflademodellen og den fysiske model danner grundlag for opstilling af den numeriske model. To metodikker anvendes typisk, den konceptuelle metode og gridmetoden.

Den konceptuelle metode inkluderer en automatiseret generering af den numeriske model ud fra den fysiske model. Der tages således hensyn til den fysiske models opdeling af modellen i geologiske enheder.

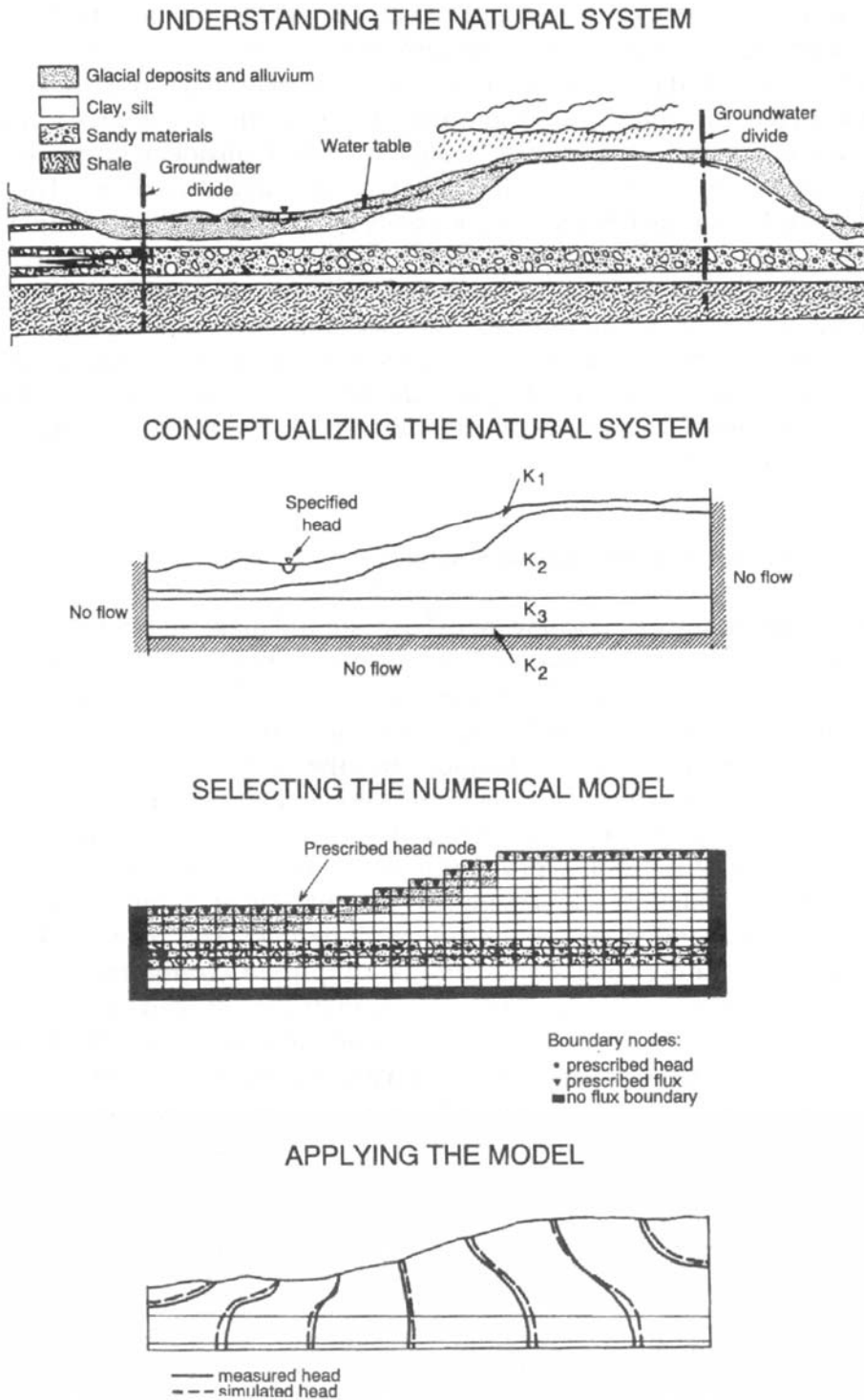
Alternativet er den gridbaserede metode. Her opstiller man først sine beregningslag for dernæst at indbygge de hydrogeologiske parametre i selve beregningscellerne. Denne metodik er faciliteret af stort set alle koder. Der er hjælpeværktøjer til at lade beregningslagene følge de geologiske laggrænser, indbygge linser osv. Processen kan sammenlignes lidt med at tegne af med et kalke-ringsparpir lagt oven på den fysiske model. Det u hensigtsmæssige ved denne model er, at det er mere tidskrævende at ændre på geologien, samt at man jo faktisk skal holde to individuelle datasæt opdateret, ændringer i den fysiske model skal jo inkluderes løbende i den numeriske model.

At komme fra disse lag og linser via en diskretisering af modelområdet gøres meget kodespecifikt. Der er få programmer, som er mere generelle, MODGIS eksempelvis. Men de er meget præget af at være udviklingsversioner, og det er derfor svært at overskue, hvorledes disse umiddelbart kan anvendes. MODGIS er eksempelvis kun lavet til UNIX versionen af ARC/INFO. GeoEditor er et dansk produkt, der er beregnet til at generere geologiske modeller. Programmet genererer information om lag og linser på en måde, der faciliterer indbygning i grundvandsmodeller.

Gridmetodikken anvendes mere eller mindre elegant af de forskellige koder. Stort set alle måder at lave sin diskretisering på i 3 dimensioner består af en beskrivelse af beregningslagenes top og bund samt en horisontal diskretisering, fælles for alle beregningslag. Typisk vil man ved denne metode lave sit numeriske net, således at beregningslagene er afgrænset tilsvarende de geologiske lag, eventuelt med flere beregningslag inden for det samme geologiske lag. På den måde kan de enkelte beregningslag hurtigt tildeles værdier svarende til, hvilket geologisk lag de ligger i. Linser er lidt mere arbejdskrævende at lægge ind. Dette gøres typisk ved at identificere, hvilke beregningslag de er til stede i, og dernæst ud fra deres horisontale udstrækning at korrigere standardværdierne tildelt beregningslaget. Denne metodik er mere eller mindre elegant faciliteret i stort set alle præprocessorer. FEFLOW, MIKE SHE samt MODFLOW-præprocessorerne Groundwater-Vistas og GMS er eksempler på sådanne programmer.

I enkelte af præprocessorerne er det muligt at specificere hydrogeologiske enheder, hvor hver enhed indeholder information om alle relevante hydrogeologiske parametre. Den rumlige fordeling af parameterværdierne foretages ved at angive, hvorledes enhederne er distribueret i beregningscellerne. Parameterværdierne for de enkelte celler bestemmes dernæst automatisk ud fra den angivne jordtypes specifikke parametre. MIKE SHE, VisualModflow og GMS har denne funktionalitet.

Den konceptuelle metode svarer til denne metode, man har blot automatiseret indlægningen af enhederne i beregningscellerne. GMS, ArgusOne og MIKE SHE anvender denne metodik og har som inddata beskrivelsen af udstrækningen af de geologiske enheder (lag og linser) i form af flader og horisontale afskæringer af linser, beskrivelse af parameterværdier for de enkelte geologiske enheder. Efter valg af diskretisering indlægger koderne automatisk værdier i de enkelte beregningsceller. Denne metodik gør det nemt at ændre på sine geologiske informationer.



Figur 6.1 Faser ved opstilling af grundvandskode for beregning af specifik problemstilling. Øverst formuleres den hydrogeologiske tolkningsmodel, derefter reduceres modellen til de mest betydende processer og fysiske opdelinger af systemet, dernæst indsættes den konceptuelle model i en specifik kode og danner dermed selve modellen (nederst).

I nedenstående tabel 6.2 er et udvalg af præprocessorer beskrevet, de understøtter alle partikelbanesimuleringer (dog ikke ArgusOne).

Tabel 6.2 Opsummering af udvalgte præprocessorer

Navn	Egenskaber	Grundvandskode
MIKE SHE	Fuldt automatiseret håndtering af lag og linser (via GeoEditor), alternativt 2D horisontalt baseret gridredigering af individuelle beregningslag.	MIKE SHE
GMS	Fuldt automatiseret, det er svært at gennemskue ud fra dokumentationen, hvorvidt linser også er automatisk indbygget. Alternativt 3D baseret grideditor. Nogen mulighed for inverts modellering.	MODFLOW-96 grundvandskode. Alternativt kan MODFLOW-SURFACT anvendes (oplyst af MODFLOW-SURFACT producent).
Visual Modflow	Gridmetode, dog med muligheder for at tildele en beregningscelle en jordtype. Mulighed for inverts modellering.	MODFLOW-96
Groundwater-Vistas/MS-VMS	Gridmetode med 2D baseret editor (3D med MS-VMS), jordtyper som mulighed. Mulighed for inverts modellering.	Er beregnet til MODFLOW-SURFACT, men kan også anvende MODFLOW96 og MODFLOWWIN32.
FEFLOW	Skiller sig ud, fordi det er en finit elementkode, beregningscellerne behøver således ikke at være "skoæsker". Der er mulighed for i meget større omfang at diskretisere finere i delområder, end ved finit differenskoder. FEFLOW er en mellemting mellem en konceptuel metode og en gridmetode.	FEFLOW
ArgusOne	Fuldt automatiseret, udviklet til MODFLOW, men kan genere data både til finit differens og finit elementkoder. ArgusOne virker som en meget kvalificeret geologisk editor, den understøtter ikke en partikeltransportkode.	FEFLOW, FEMWATER, MODFLOW96, MODFLOW2000 samt via makro script mange andre.

Anbefalinger:

Ovenstående gennemgang baseret på den umiddelbart tilgængelige information om forskellige præprocessorer giver anledning til følgende anbefalinger:

- MS-VMS kan vælges, hvis der ønskes anvendt MODFLOW-SURFACT eller MODFLOW-WIN32 som grundvandskode. Denne kode understøtter automatisk fordeling af egenskaber ud fra stokastiske parametre. Det er således muligt at gennemføre et antal, ex. 100, simuleringer med forskellige fordeling af den hydrauliske ledningsevne, alle 100 simuleringer gennemføres med efterfølgende partikelbane beregning. Til sidst kan resultatet af alle simuleringerne plottes op på forskellige måder for at belyse variationer i resultatet som funktion af den givne variation i parameterværdierne.
- GMS, hvis der ønskes anvendt MODFLOW96 eller MODFLOW-SURFACT som grundvandskode. GMS har mulighed for "solid modelling" en metode der kan beregnes 3D rumlig udbredelse af geologiske formationer.
- MIKE SHE, hvis der ønskes koblet grundvand med umættet zone og vandløb.
- Både GMS og MIKE SHE (via Geoeditor) kan håndtere den geologiske model samt automatisk overførsel fra den geologiske model til det numeriske net. Information om MS-VMS og GMS kan findes på internetadressen www.scisoftware.com, MIKE SHE kan findes på www.dhisoftware.com/mikeshe. Prisen på produkterne ligger i intervallet 10.000 til 40.000 kr. for en pakke, der indeholder både selve beregningsmodulerne og præprocessorerne. Typisk vil de koder med flest muligheder for koblede processer og flot grafik være dyrest. For mange koders vedkommende er det muligt at få speciel rabat hvis koden kun skal anvendes i begrænset

omfang. Alle præprocessorer kan arbejde sammen med GIS. Dette gøres mere eller mindre elegant dels afhængigt af præprocessoren og del afhængigt af GIS-systemet. Det er ikke muligt ud fra "reklame" beskrivelserne at vurdere præcist deres GIS-funktionalitet. Dette gøres bedst ved at teste kode mod det pågældende GIS-system. De fleste af koderne kan erhverves i en testperiode mod et mindre beløb, så de direkte udgifter ved en sådan test ikke er så store. Det anbefales under alle omstændigheder at afprøve "demo" versioner, før en endelig beslutning tages. Der kan være en forskel mellem den reklamerede og den reelle funktionalitet af programkoden.

6.4 BESKRIVELSE AF DATABASEHOVET I FORHOLD TIL VALGTE MODEL OG INKLUDEREDE PROCESBESKRIVELSER

Generelt for koderne og deres mulige procesbeskrivelse er, at de er i stand til at udnytte den datamængde og -type, der typisk er til rådighed. Ved en opsætning af en tredimensional grundvandsmodel vil informationer om eksempelvis hydraulisk ledningsevne skulle angives for hver enkelt celle, teoretisk er der altså mulighed for at opgive disse informationer i en stedlig skala svarende til cellestørrelsen. Typisk vil de direkte informationer om hydraulisk ledningsevne været angivet for en pumpetest foretaget i en enkelt boring. Denne information vil man så ekstrapolere til at være dækkende for et helt geologisk lag, eller et delområde langt i udstrækning langt overstigende influensradius for pumpetesten. Tilsvarende kan modellen håndtere en tidlig opløsning på helt ned til time niveau, hvor potentiale data typisk findes som månedsværdier. I det tilfælde at man opererede med en trykniveau randbetingelse ville man så ekstrapolere den målte månedlige værdi til at være gældende for hele perioden. For at anvende målte data i modeller er det altså i mange tilfælde nødvendigt at interpolere i tid og sted for at skaffe fornøden information til modellen.

Jo mere sofistikeret en procesbeskrivelse, der vælges i den konceptuelle model, jo flere data eller parametre vil der typisk være behov for at specificere. Dette kan give sig udtryk i enten at der skal angives en finere variation i en enkelt parameter værdi, eller at procesformuleringen vil forøge antallet af parametre der skal beskrives. Ved et valg af en geologisk model med 5 lag i stedet for 3 vil det eksempelvis være nødvendigt at specificere udstrækningen af flere lag, samt eventuelt også andre hydrogeologiske parameter værdier. Ved valg af en konceptuel model der inkluderer en beskrivelse af den umættede zone vil parameter mængden øges til også at inkludere parameterværdier for umættet zone strømning.

I nedenstående tabel 6.3 er det voksende behov for data og parametre, der efterfølger valget af en mere kompleks procesbeskrivelse, forsøgt anskueliggjort. Tabellen er ikke endelig, der er for mange af processernes vedkommende en mere nuanceret overgang fra en simpel til avanceret beskrivelse.

Hvilken procesbeskrivelse der vælges, simpel eller avanceret, vil altså til dels afhænge af de informationer, der er til rådighed. Typisk er der ikke data til de mere avancerede procesbeskrivelser, og anvendelse af en simpel procesbeskrivelse synes ligefrem. Der er dog et tredje alternativ, at anvende en avanceret beskrivelse med en simplificering af parameterværdierne. Et eksempel kunne være vandløb. Vandløb kan simuleres simpelt ved at beskrive variationen i vandspejlet i den enkelte celle, hvor vandløbet er beliggende, samt tildele en lækagekoefficient. Denne beskrivelse kræver, at man meget nøje kontrollerer, om vandbalancen overholdes for den enkelte vandløbsstrækning.

Tabel 6.3 Eksemplificering af databehov ved skift fra simpel til avanceret procesbeskrivelse

Type	Beskrivelse	
	Simpel	Avanceret
Grundvandszonen	Rumlig fordeling af hydraulisk ledningsevne, magasintal, trykniveau, placering samt tidlig variation i indvindinger	+ sprækkegeometri, lagorientering, principiel retning af hydraulisk ledningsevne
Umættet zone	Fordeling i tid og sted af perkolation, evt. beregnet med rodzonemodel	+ rumlig fordeling af umættede hydrauliske egenskaber, planteinteraktion (rodtybde, vandoptag), overfladeruhed, nedbør, evaporation (afledt af en yderligere række parametre og variable), makroporer
Dræn	Horisontal og vertikal placering, modstandskoefficient	+ routning
Søer	Vandspejl, horisontal udstrækning, lækagekoefficient	+ geometri, til- og afløbsmængder, tidsvarierende fordampning
Vandløb	Vandspejl, horisontal placering, lækagekoefficient	+ vandløbstværsnit, afgrødevariationer, flowmålinger

Der må jo ikke infiltrere mere vand, end der fysisk er til rådighed. Altså vil en simpel beskrivelse medføre en del kalibrering samt kontrol af data. Ved at vælge en mere avanceret beskrivelse (med simple antagelser om vandløbstværsnitsudformninger) vil modellen holde øje med vandbalancen samt beregne variationer i vandstanden. Desuden vil modellen give indtryk af den interne vandtransport, der er mellem delområder i oplandet. I mange tilfælde vil den sidste metode give flere informationer og skabe en bedre ramme for at vurdere resultaternes validitet.

Hvilken procesbeskrivelse der anvendes, må afvejes i det enkelte tilfælde. Også koden spiller ind her, MIKE SHE kan ex. kun håndtere dræn i øverste beregningslag, hvor andre koder er mere fleksible.

6.5 REFERENCER

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

Hansen, S., Jensen, H. E., Nielsen, N.E. & Svendsen, H. (1990). Daisy – soil plantatmosphere system model. Technical Report A10, Miljøstyrelsen.

www.scisoftware.com, et indkøbssted for mange grundvandsmodeller

www.hgl.com, udvikleren af MODFLOW-SURFACT

www.usgs.gov, udvikleren af MODFLOW

www.dhi.dk, udvikleren af MIKE SHE