

## APPENDIX B INVERS KALIBRERING AF DK-MODEL SØNDERJYLLAND

Torben Obel Sonnenborg, Britt S.B. Christensen og Hans Jørgen Henriksen  
*Hydrologisk afdeling, GEUS*

Nøglebegreber: Invers kalibrering, automatisk parameterestimation, parameterusikkerhed, DK-model Sønderjylland

**ABSTRACT:** Anvendelse af DK-modellerne som et værktøj til analyse af Danmarks tilgængelige drikkevandsressource er stærkt afhængig af, at modellerne er velkalibrerede. Med det formål at forbedre modellernes evne til at reproducere grundvandsmagasinerne dynamik, er der udviklet en invers kalibreringsprocedure, som gør det muligt at estimere de vigtigste grundvandsparametre ud fra objektive kriterier. I dette notat beskrives resultaterne af invers kalibrering af DK-model Sønderjylland. Det illustreres, hvordan den inverse model kan anvendes dels til at identificere, hvilke parametre der skal inkluderes i kalibreringsprocessen, dels til at optimere den opstillede model og tilvejebringe estimater for modelparametrene. Pålideligheden af de estimerede parametre vurderes bl.a. ud fra de beregnede usikkerhedsestimater. Generelt vurderes både de estimerede parametre og den resulterende overensstemmelse mellem observerede data og modelsimuleringer at være tilfredsstillende.

### B.1 INDLEDNING

DK-modellerne for Fyn (Henriksen et al., 1997) og Sjælland (Henriksen et al., 1998) blev kalibreret manuelt mod transiente observationer af hydraulisk trykniveau og vandløbsafstrømning. Det er efterfølgende fundet ønskeligt at anvende automatisk kalibrering af DK-modellerne, hovedsageligt pga. følgende faktorer: (1) Manuel kalibrering med en ikke-stationær model på størrelse med en typisk DK-model kan være en vanskelig og uoverskuelig opgave, (2) automatisk kalibrering er forbundet med en mindre grad af subjektivitet, (3) automatisk kalibrering kan resultere i bedre kalibreringsresultater og (4) hvis den automatiske kalibrering formuleres i en statistisk sammenhæng vil der være mulighed for kvantificering af eksempelvis parameterusikkerhed og parameterkorrelation.

I forbindelse med kalibrering af DK-model Sønderjylland blev det derfor besluttet at udvikle en automatisk (invers) optimeringsprocedure til MIKE SHE, der anvendes som hydrologisk model. Som optimeringsalgoritme blev UCODE (Poeter and Hill, 1998) valgt. UCODE er et generelt optimeringsværktøj, som er udviklet ved USGS i Denver, med det primære formål at kunne anvendes til parameterestimation i forbindelse med grundvandsrelaterede problemstillinger.

Da ikke-stationær modellering med MIKE SHE på systemer svarende til en typisk DK-model (dvs. problemstilling og antal numeriske celler) er forbundet med lange simuleringstider (af størrelsesorden dage), er det vanskeligt at udføre invers modellering med den ikke-stationære model. Det er derfor besluttet at basere den inverse model på en stationær version af MIKE SHE (<http://www.vandmodel.dk/balance.htm>).

I det følgende beskrives kalibreringen af DK-model Sønderjylland under anvendelse af invers optimering. Først beskrives udvælgelsen af kalibreringsdata og vurderingen af datamaterialets kvalitet. Dernæst fastsættes såvel kvantitative som kvalitative kalibreringskriterier. Valg af kalibreringsparametre gennemgås i afsnit 4, som efterfølges af en beskrivelse af den anvendte estimationsmetode. Endelig præsenteres resultaterne af estimationsprocessen både mht. de optimerede parametre og overensstemmelsen mellem observationsdata og modelsimuleringer.

## B.2 OBSERVATIONSDATA

Til kalibreringen af den stationære model er der anvendt observationer af hydraulisk trykniveau og median minimum. I det følgende beskrives udvælgelsen af data samt usikkerheden på disse.

### B.2.1 Hydraulisk trykniveau

De observerede trykniveaudata stammer fra Jupiter databasen, hvorfra observationer foretaget efter 1970 er anvendt. I de terrænnære beregningslag er der relativt mange data til rådighed, og der er derfor foretaget en reduktion af datagrundlaget efter følgende retningslinier: (1) Der inkluderes kun data fra en boring pr. numerisk element, (2) i de tilfælde, hvor der er flere målinger til stede i en boring, er der foretaget en aritmetrisk midling af data, (3) det tilstræbes at opnå en jævn fordeling af observationsdata indenfor hvert enkelt beregningslag, og (4) observationsværdier, der afviger markant fra det generelle trykniveaubillede i området, elimineres. Med det formål at identificere afvigende målinger blev det observerede trykniveau for hvert beregningslag kontureret og punkt-målingernes værdi blev påført. Herved kunne ”outliers” erkendes og forkastes som kalibreringsdata.

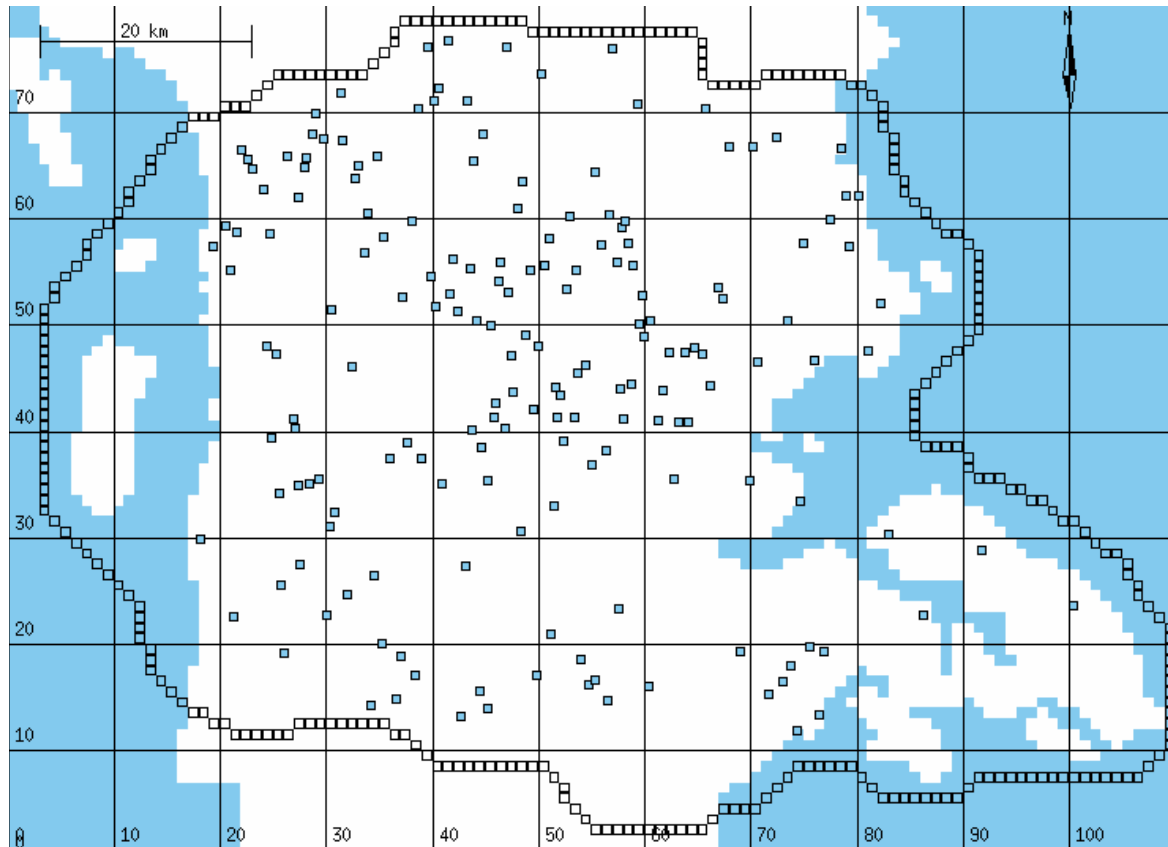
Ovenstående procedure resulterede i udvælgelse af 1221 observationsværdier fordelt på de 16 beregningslag. Densiteten af data er størst i de øverste beregningslag og falder signifikant med dybden, se tabel 1. Der er således kun 6 observationer til rådighed i lag 16, som er beliggende mellem kote -180 og -220 m. I figur 1 ses et eksempel på fordelingen af observationsboringer inkluderet i modelkalibreringen (fra beregningslag 3).

Der er ikke foretaget nogen vurdering af de observerede trykniveaudata mht., hvornår på året de er målt. Det antages imidlertid, at målingerne er gennemført jævnt fordelt over året (for alle boringerne under ét) og at observationerne i middel repræsenterer en gennemsnitstilstand i reservoiret.

Da der anvendes en stationær model vil usikkerheden på trykniveaudata pga. ikke-stationære effekter være signifikant. Desuden vil der optræde måle- og modelfejl (samlet benævnt observationsfejl) som skyldes måleusikkerhed, ikke beskrevet variation i topografi, interpolation af beregnet trykniveau, usikkerhed mht. den vertikale placering af filtersætning samt den numeriske repræsentation af denne, og ikke modelleret geologisk heterogenitet. Tilsammen vurderes usikkerheden på trykniveaudata i området at variere fra 3 til 5 m (udtrykt ved standardafvigelsen). Den største usikkerhed er tillagt observationer fra de øverste beregningslag, dels pga. en markant effekt fra den grove beskrivelse af topografien (1 x 1 km grid), dels pga. usikkerhed på placering og indvindingsgrad fra terrænnære markvandingsboringer.

**Tabel 1** Antal observationer af hydraulisk trykniveau udvalgt til kalibrering fra hvert beregningslag. Standardafvigelsen på de enkelte lags observationer er også anført.

Beregningslag	Laggrænser (kote i m)	Antal observationer	Standardafvigelse (m)
1	terræn – GVS	224	5
2	GVS – variabel	191	5
3	variabel - -10	177	5
4	-10 - -20	207	5
5	-20 - -30	156	4
6	-30 - -40	94	4
7	-40 - -50	44	4
8	-50 - -60	20	3
9	-60 - -70	13	3
10	-70 - -80	13	3
11	-80 - -90	10	3
12	-90 - -100	12	3
13	-100 - -120	19	3
14	-120 - -140	16	3
15	-140 - -180	18	3
16	-180 - -220	6	3



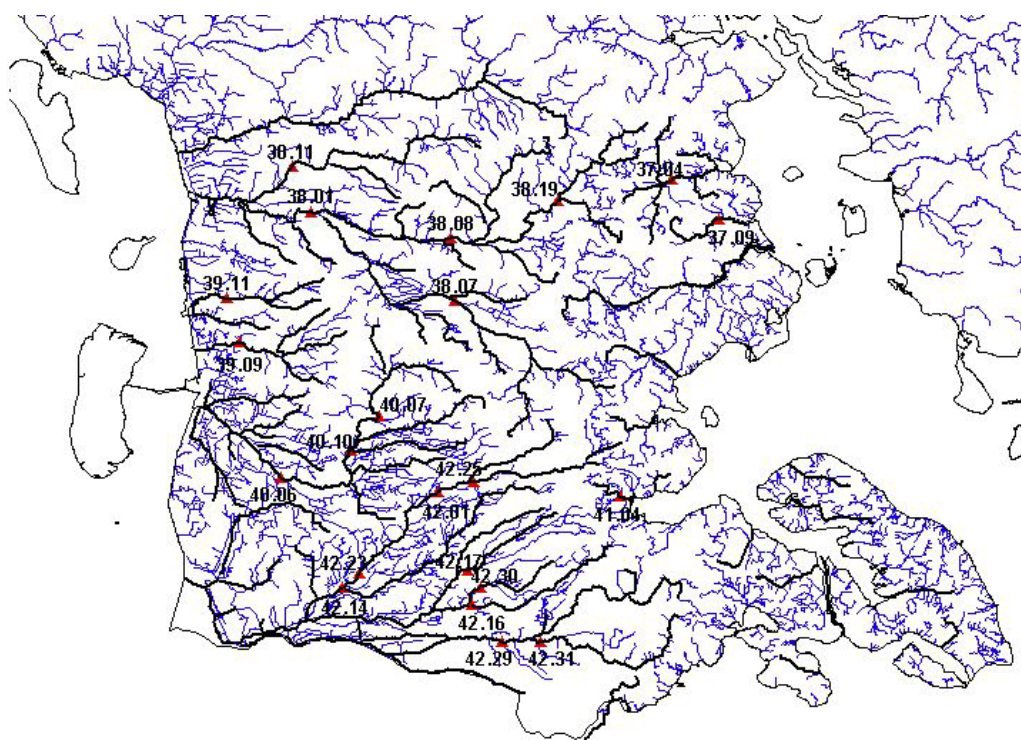
**Figur 1** Placering af udvalgte boringer med filtersætning i beregningslag 3.

### B.1.2 Vandløbsafstrømning

Medianminimumsdata antages i nærværende sammenhæng at repræsentere strømmingen gennem den mættede zone til/fra vandløb. Medianminimumsværdierne kan dermed sammenlignes med grundvandstilstrømningen, der beregnes som Darcy-strømningen til/fra søer og vandløb i den stationære model.

Der er udvalgt 22 stationer, hvorfra medianminimum anvendes til kalibreringen, se figur 2 og tabel 2. De udvalgte stationer, som alle er faste vandføringsstationer, fordeler sig relativt jævnt indenfor modelområdet og repræsenterer et samlet oplandsareal på 1953 km<sup>2</sup>. Medianminimums-estimerne bygger på en tidsserie på 20 år (Sønderjyllands Amt, 1996). Nogle af de udvalgte stationer udgør deloplande til større oplande (f.eks. er station 38.08 delopland til station 38.01), og det må derfor forventes, at de pågældende vandføringer er korreleret. Korrelationen vurderes dog ikke at være større, end at samtlige data vil give vigtig information i kalibreringsprocessen.

Usikkerheden på medianminimumsdata (samtlige fejl, som modellen ikke kan reproducere) er fastlagt ud fra en analyse af (1) usikkerheden på selve medianminimumsværdien, og (2) modellens evne til at simulere oplande med forskellig karakteristika. Standard afvigelsen er for stationer med vandføring større end 1.0 m<sup>3</sup>/s vurderet til 10%, ved stationer med vandføring 0.1 – 1.0 m<sup>3</sup>/s til 20%, ved stationer med medianminimum på 0.05 – 0.10 m<sup>3</sup>/s til 50%, og for stationer med en vandføring på mindre end 0.05 m<sup>3</sup>/s til 100%. Usikkerhedsvurderingen er baseret på, at medianminimum er relativt dårligt bestemt ved stationer med lille specifik vandføring, samt at DK-modellen pga. gridstørrelsen på 1 km x 1 km vil være bedre til at simulere afstrømning fra store oplande i forhold til små oplande. I tabel 1 er den vurderede standardafvigelse angivet i kolonnen længst til højre.



**Figur 2** Placering af stationer hvorfra medianminimumsdata er anvendt som kalibreringsgrundlag. Vandløb inkluderet i modellen er fremhævet med fed.

**Tabel 2** Udvalgte vandføringsstationer og medianminimum for Sønderjyllands Amt (Sønderjyllands Amt, 1996, og Ribe Amt, 1994).

Station nr.	Stationsnavn	Oprettelsesår	Opland (km <sup>2</sup> )	Med. min. (l/s/km <sup>2</sup> )	Med. min. (l/s)	Standard afv. (l/s)
37.04	Taps Å	1974	66	1.3	85	43
37.09	Sillerup Bæk	1985	30	1.2	35	35
38.01	Ribe Å	1933	680	5.0	3400	340
38.07	Gels Å	1982	168	5.8	980	98
38.08	Gram Å	1983	276	4.4	1210	121
38.11	Hjortvad Å	1985	118	4.4	520	104
38.19	Nørreå	1989	97	1.6	154	31
39.09	Brøns Å	1972	94	3.3	315	63
39.11	Rejsby Å	1988	43	1.0	44	44
40.06	Brede Å (opst.)	1959	290	3.4	1000	100
40.07	Løbæk	1983	96	2.2	210	42
40.10	Ny Havnebæk	1987	23	5.2	119	24
41.04	Slotsmølleå	1986	14	6.5	90	45
42.01	Arnå	1962	103	4.5	455	91
42.14	Vidå	1977	248	4.0	1000	100
42.16	Uge Bæk	1979	45	6.9	310	62
42.17	Sønderup Å	1979	45	3.8	170	34
42.23	Arnå	1985	168	3.4	570	114
42.25	Rødå	1985	53	1.9	100	20
42.29	Sønderå	1986	239	3.4	820	164
42.30	Terkesbøl Å	1986	41	3.7	153	31
42.31	Gejl Å	1986	80	3.0	238	48

### B.3 KALIBRERINGSKRITERIER

I det følgende defineres såvel kvantitative som kvalitative kriterier for kalibreringsresultatet. De kvantitative kriterier formuleres ud fra normer, der på forskellig måde udtrykker den gennemsnitlige afvigelse mellem data og model.

*ME* (mean error eller middelfejl) udtrykker den gennemsnitlige afvigelse mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel. I det følgende defineres *ME* både for trykniveau og medianminimum. For hydraulisk trykniveau fås

$$ME_h = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h_{obs,i} - h_{sim,i}) \quad (1)$$

hvor  $n$  er antallet af trykniveauobservationer. *ME* kan give et indtryk af, om der introduceres nogen overordnet fejl i modelresultaterne, dvs. om f.eks. trykniveauet simuleres generelt for lavt eller højt. Hvis  $ME \rightarrow 0$ , vil der globalt set ikke optræde systematiske fejl i modellen.

For grundvandstilstrømningen anvendes den relative fejl, idet afvigelsen mellem observeret og simuleret vandføring skaleres med den observerede vandføring. Middelfejlen kan hermed udtrykkes som

$$ME_Q = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left( \frac{Q_{obs,j} - Q_{sim,j}}{Q_{obs,j}} \right) \quad (2)$$

hvor  $m$  er antallet af medianminimumsdata ( $Q_{obs,j} > 0$ ).

RMS (root mean squared error eller middelværdien af kvadratafvigelsessummen) er det kriterium, der oftest anvendes til at måle den opnåede overensstemmelse mellem data og model

$$RMS_h = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h_{obs,i} - h_{sim,i})^2} \quad (3)$$

Denne norm beregner standardafvigelsen på trykniveauresidualerne, og kan sammenlignes direkte med den estimerede standardafvigelse på observationsdata.

Tilsvarende defineres RMS-værdien for grundvandstilstrømning som

$$RMS_Q = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left( \frac{Q_{obs,j} - Q_{sim,j}}{Q_{obs,j}} \right)^2} \quad (4)$$

idet den relative fejl igen er anvendt til at karakterisere overensstemmelsen mellem observeret og simuleret grundvandstilstrømning ( $Q_{obs,j} > 0$ ).

*SE* (standard error, goodness of fit eller standardafvigelsen) er et direkte mål for modellens evne til at reproducere de observerede data

$$SE = \sqrt{\frac{1}{n + m - P} \sum_{i=1}^{n+m} \left( \frac{\psi_{obs,i} - \psi_{sim,i}}{s_{obs,i}} \right)^2} \quad (5)$$

hvor  $\psi$  er tilstandsvariablen (trykniveau eller vandføring),  $s_{obs,i}$  er standardafvigelsen på observationsdata nr.  $i$  (hvormed residualerne vægtes), og  $P$  er antallet af kalibreringsparametre. I en regressionsmæssig sammenhæng angiver  $n + m - P$  antallet af frihedsgrader. Når samtlige modelfejl er elimineret og kun observationsfejl resterer, vil  $SE \rightarrow 1$ . *SE* giver dermed et direkte mål for, hvor

godt de observerede værdier (trykniveau og medianminimum under ét) simuleres i forhold til usikkerheden på observationerne.

I tabel 3 er der opført kriterier for hhv. ME, RMS og SE. For ME er specificeret, at der maksimalt må optræde en gennemsnitlig fejl på 5% af den samlede trykniveauvariation indenfor området,  $\Delta H$ . Mht. RMS skal fejlen være indenfor 10% af  $\Delta H$ . SE må maksimalt blive 2, hvilket svarer til, at observationerne i gennemsnit simuleres indenfor to standardafvigelse.

**Tabel 3** Kvantitative kriterier til kalibreringsresultatet.  $\Delta H$  er den maksimale trykniveauforskel i modelområdet.

Datatype	ME	RMS	SE
Hydraulisk trykniveau, h	$0.05 \cdot \Delta H$	$0.1 \cdot \Delta H$	2
Grundvandstilstrømning, Q	0.1	0.3	

Foruden de kvantitative krav opstillet ovenfor, skal følgende kvalitative kriterier være opfyldt: (1) De estimerede parametre skal have realistiske værdier. I det efterfølgende afsnit 4 vil fysisk plausible intervaller for kalibreringsparametrene blive opstillet. (2) Residualerne skal have en fornuftigt rumlig fordeling. Selv om kriteriet for ME er opfyldt for området under ét, kan der sagtens være områder, hvor modellen konsekvent simulerer for store eller små værdier.

#### B.4 UDVÆLGELSE AF KALIBRERINGSPARAMETRE

Den stationære model inkluderer den mættede zone, drænvandsafstrømning samt udveksling med vandlegemer såsom søer og vandløb. De inkluderede parametre er derfor begrænset til den horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevne, vandløbslækagekoefficient samt tidskonstant for drænvandsafstrømning til vandløb og modelrande. Initielt er kun den hydrauliske ledningsevne distribueret. Distribueringen er defineret af den geologiske model, som er tolket vha. fem bjergarter: Smeltevandssand (ss), moræneler (ml), kvartssand (ks), glimmersand (gs) og glimmerler (gl). Den geologiske tolkning er nærmere beskrevet i Christensen et al. (2000), hvor resultaterne af en manuel grovkalibrering af et delområde af Sønderjylland også kan findes.

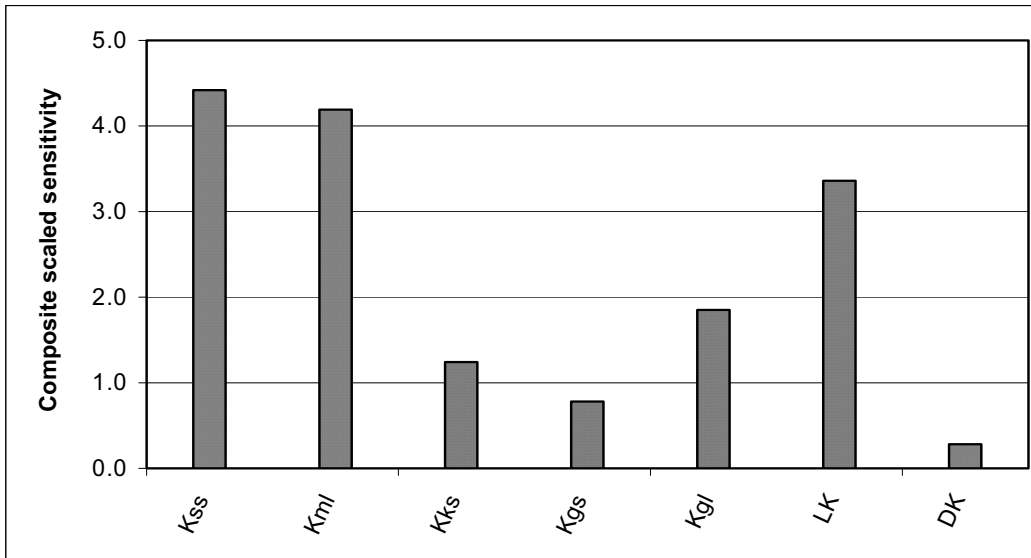
Udvælgelsen af kalibreringsparametre baseres i nærværende sammenhæng på en sensitivitetsanalyse (Hill, 1998), hvor der foruden de fem hydrauliske ledningsevner indgår vandløbslækagekoefficient og drænkoefficient. Ingen af de to sidstnævnte parametre er distribueret. Resultatet af analysen ses i figur 3, hvor den såkaldte "composite scaled sensitivity" for hver parameter er angivet. Composite scaled sensitivity er et mål for, hvor stor indflydelse en parameter har på simuleringen af observationsdata. En høj værdi angiver, at parameteren har stor betydning for simuleringens resultat, og det vil derfor være hensigtsmæssigt at inkludere parameteren i estimationsprocessen.

Det ses af figur 3, at resultaterne er mest sensitive overfor de hydrauliske ledningsevner samt vandløbslækagekoefficienten. Mht. den hydrauliske ledningsevne er sensitivitetens værdi udtryk for den samlede effekt af den horisontale og vertikale ledningsevne, idet de to komponenter er koblet sammen via en anisotropifaktor. Drænkoefficienten har relativt ringe betydning for simuleringen af trykniveaudata og grundvandstilstrømning, hvilket er i overensstemmelse med forudsætningerne for analysen.

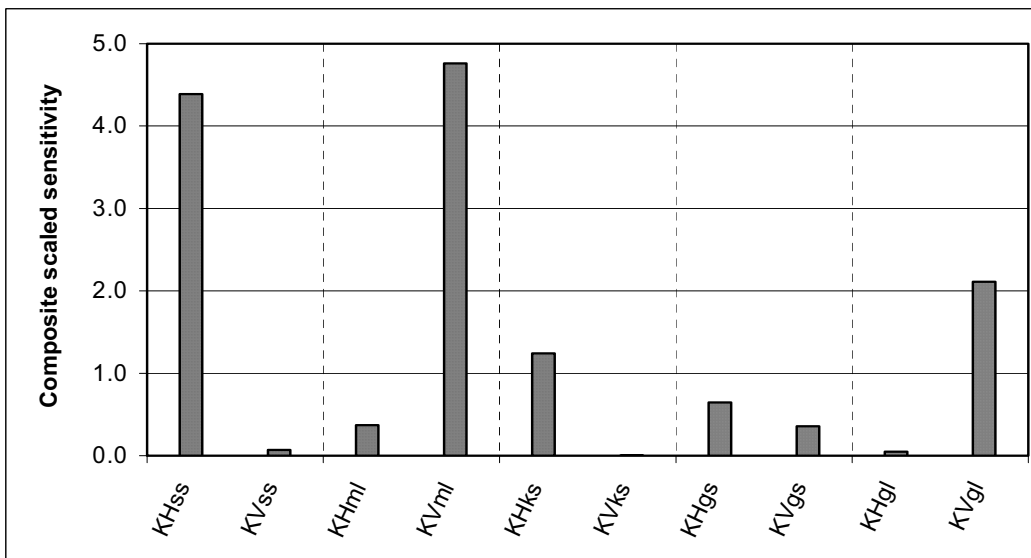
Baseret på resultaterne af sensitivitetsanalysen vælges det at inkludere de fem hydrauliske ledningsevner samt vandløbslækagekoefficienten i kalibrering af modellen.

For at kunne vurdere, hvordan hhv. den horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevne influerer på resultaterne, er der desuden foretaget en sensitivitetsanalyse på hver komponent for de fem geologiske enheder. Resultatet ses af figur 4. Det ses, at betydningen af den horisontale og vertikale ledningsevne er meget forskellig for de fem enheder. For de sandede formationer (smeltevandssand, ss, og kvartssand, ks), er det stort set kun den horisontale ledningsevne, der har betydning, mens den vertikale ledningsevne er den vigtigste komponent for de lerede formationer (moræneler, ml, og glimmerler, gl). Mht. glimmersand (gs) er den horisontale komponent dominerende men den vertikale komponent har også en vis betydning for resultatet. Da det generelt kun er den ene komponent, som har betydning for simuleringens resultat, vælges det at estimere hver ledningsevne

samlet (horisontal og vertikal ledningsevne simultant), idet der anvendes en anisotropifaktor (KV/KH) på 0.1 for alle geologiske enheder. Det skal imidlertid pointeres, at det i praksis er den sensitive komponent af den hydrauliske ledningsevne, som estimeres. F.eks. vil den vertikale ledningsevne for smeltevandssandet primært blive bestemt af den horisontale ledningsevne (samt af det specificerede anisotropiforhold) og sekundært af parameterens indflydelse på overensstemmelsen mellem observationsdata og modelresultater.



**Figur 3** Beregnet "composite scaled sensitivity" for 7 parametre. K angiver hydraulisk ledningsevne. LK og DK er hhv. lækagekoefficient og drænkoefficient.



**Figur 4** Sensitivitetsanalyse af hhv. horisontal (KH) og vertikal (KV) hydraulisk ledningsevne for de fem definerede hydrogeologiske enheder.

De initiale parameterestimer er baseret på grovkalibreringen udført af Christensen et al. (2000). Værdierne er angivet i tabel 4, hvor der også er opført estimer for, hvad der anses som realistiske grænser for de enkelte parameters værdi. De anslåede minimums- og maksimumsværdier for hydraulisk ledningsevne er fastsat på baggrund af Harrar and Henriksen (1996) og PALAEUX (1999). Mht. vandløbslækagekoefficienten har der i tidligere modelarbejder, hvor vand-

udvekslingen mellem grundvandszonen og vandløbene udelukkende beskrives ved lækagekoefficienten (og ikke af egenskaberne for de geologiske lag, der grænser op til vandløbet), været anvendt lækagekoefficienter i området  $10^{-10}$ - $10^{-6}$  s<sup>-1</sup> (Dahl et al., 1998). Der er derfor specificeret relativt brede grænser for vandløbslækagekoefficienten.

**Table 4** *Initielle estimater for kalibreringsparametrene samt vurdering af rimelige minimums- og maksimumsværdier.*

Parameter	Initial værdi	Minimum værdi	Maksimum værdi
Kss (m/s)	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-3}$
Kml (m/s)	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-6}$
Kks (m/s)	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$
Kgs (m/s)	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-4}$
Kgl (m/s)	$1 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-7}$
LK (s <sup>-1</sup> )	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-6}$

## B.5 KALIBRERINGSPROCEDURE

### B.5.1 Opsætning af stationær model

Da der anvendes en stationær model, har det været nødvendigt at reducere den beregnede nettonedbør betydeligt, da den stationære model ikke inkluderer effekter som overfladevandsafstrømning, interflow og drænvandsafledning som følge af kraftige regnhændelser. Baseret på en analyse af medianminimumsafstrømning for hele Sønderjylland er det fundet, at den årlige nettonedbør skal multipliceres med en faktor 0.3 for at opnå overensstemmelse mellem input til og output fra modellen (grundvandsindvinding samt udstømning til søer, vandløb og havet).

Det er valgt at anvende året 1990 til kalibreringskørslerne. Modellen køres derfor med påvirkninger (nettonedbør samt grundvandsindvinding) svarende til, hvad der i middel er gældende for 1990. Da 1990 i hydrologisk sammenhæng var et relativt gennemsnitligt år, forventes det at repræsentere middeltilstanden i området acceptabelt.

### B.5.2 Invers metode

UCODE er baseret på vægtede mindste kvadraters metode, og lokaliseringen af den optimale model foretages vha. en modificeret Gauss-Newton metode. UCODE estimerer kalibreringsparametrene iterativt, med det formål at minimere størrelsen af objektiv funktionen G, der i nærværende sammenhæng kan opskrives som:

$$G = \sum_{i=1}^n \left( \frac{h_{obs,i} - h_{sim,i}}{s_{h,i}} \right)^2 + \sum_{j=1}^m \left( \frac{Q_{obs,j} - Q_{sim,j}}{s_{Q,j}} \right)^2 \quad (6)$$

hvor n er antallet af trykniveauobservationer,  $h_{obs,i}$  og  $h_{sim,i}$  er hhv. den i'te observationsværdi og tilsvarende simulerede værdi af trykniveauet,  $s_{h,i}$  er standardafvigelsen på den i'te trykniveauobservation, m er antallet af medianminimumsværdier,  $Q_{obs,j}$  er den j'te medianminimumsværdi og  $Q_{sim,j}$  er den tilsvarende simulerede værdi, og  $s_{Q,j}$  er standardafvigelsen på den j'te medianminimumsværdi. Størrelsen af standardafvigelserne  $s_h$  og  $s_Q$  kan findes i hhv. tabel 1 og 2.

De simulerede trykniveauværdier,  $h_{sim,i}$ , beregnes ved lineær interpolation mellem de fire nodepunkter nærmest koordinaterne for observationsboringen. Til dette formål benyttes programmet GridGym (Hansen, 1997). Det simulerede flow,  $Q_{sim,j}$ , beregnes vha. MIKE SHE output retrieval programmet mshe\_or, der beregner den samlede grundvandsstrømning til/fra vandløbet opstrøms den aktuelle vandføringsstation (Q-station i MIKE SHE-terminologi).

Det er valgt at afslutte optimeringen, når der er foretaget  $N_{it} = 2P$  inverse iterationer, hvor P er antallet af kalibreringsparametre. I praksis har det vist sig, at reduktionen i objektiv funktionens

størrelse er minimal, når antallet af iterationer nærmer sig  $2P$ . Da der kan optræde undtagelser fra denne regel, undersøges udviklingen af objektiv funktionen konsekvent, når optimeringen er afsluttet. Hvis  $G$  konvergerer asymptotisk mod en konstant værdi, betragtes optimeringsprocessen som værende afsluttet.

Den samlede tid, det kræver at gennemføre en invers simulering, kan vurderes på følgende måde: Der skal foretages  $P+1$  modeleksekveringer pr. invers iteration. MIKE SHE eksekveres derfor i alt  $N_{MS} = N_{it}(P+1) + 2P$  gange, hvor de sidste  $2P$  eksekveringer udføres med det formål at beregne bl.a. usikkerhed på de optimerede parametre. Ved anvendelse af eksempelvis 8 kalibreringsparametre skal MIKE SHE eksekveres  $N_{MS} = 160$  gange for at fuldføre optimeringen. Da simuleringstiden (ved anvendelse af en almindelig Pentium computer) for det aktuelle modelområde er på mellem 5 og 30 minutter (afhænger af parametrenes værdi), tager det typisk et til to døgn at gennemføre en invers simulering.

Både den hydrauliske ledningsevne og vandløbslækagekoefficienten er log-transformeret, når optimeringen gennemføres. Herved opnås, at alle kalibreringsparametre har samme størrelsesorden til trods for at de fysiske værdier varierer over mange dekader.

### *B.5.3 Ændringer af kalibreringsmodel*

Initielt blev modellen kalibreret med anvendelse af en homogen værdi af lækagekoefficienten for samtlige vandløb. Det var imidlertid ikke muligt at opnå et tilfredsstillende resultat med denne antagelse, og det var derfor nødvendigt at distribuere vandløbslækagekoefficienten. Distribueringen af lækagekoefficienten er baseret på bjergartsfordelingen angivet på jordartskortet for området. Vandløb beliggende i den sydvestlige del af Sønderjylland er generelt lokaliseret i højpermeable sedimenter (smelte- og ferskvandsaflejringer), mens vandløb beliggende i den østlige del (samtlige vandløb som munder ud på den østjyske kyst) og den centrale del af det nordlige modelområde er lokaliseret i lavpermeable materialer (moræneler). Det blev på denne baggrund valgt at arbejde videre med to lækagekoefficienter, én hver for områder karakteriseret ved hhv. sand/grus-sedimenter (LKhøj) og lersedimenter (LKLav).

Randbetingelsen i det nordøstlige hjørne af modelområdet blev under kalibreringsprocessen ændret fra nul-gradient til fastholdt trykniveau. Nul-gradient randen gav anledning til overestimation af trykniveauet tæt på randen, hvilket skyldes, at gradienten på det hydrauliske trykniveau her er rettet ud af modelområdet. Problemet blev afhjulpet ved i stedet at anvende en fastholdt tryk-randbetingelse, hvor trykniveauet i randelementerne blev fastlagt ud fra interpolation af trykniveauobservationer fra Jupiter databasen.

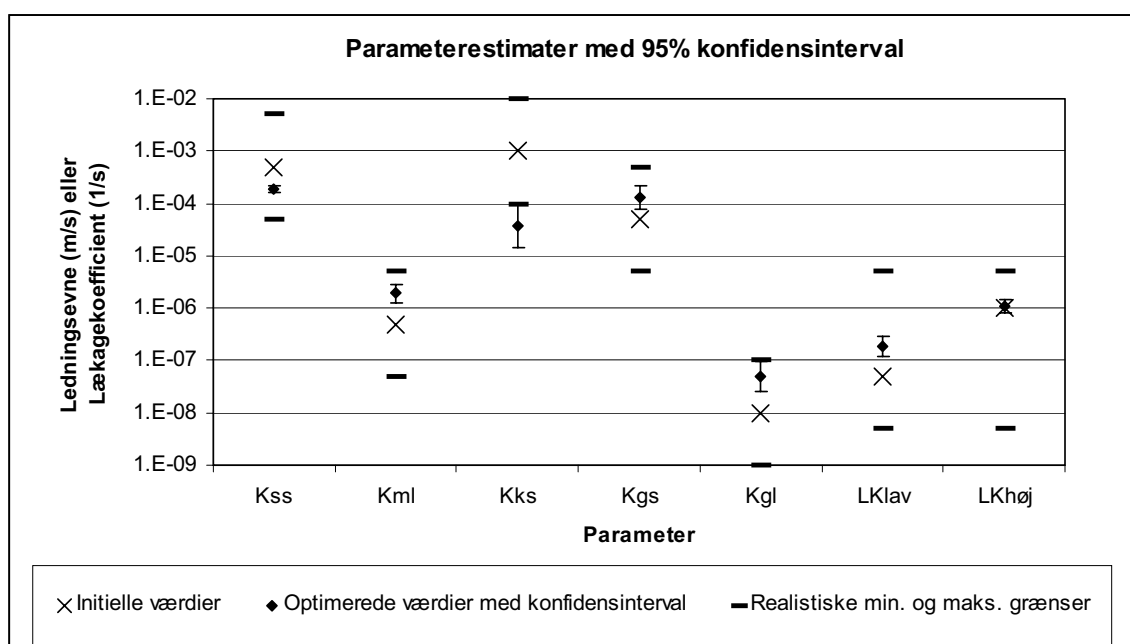
## **B.6 KALIBRERINGSRESULTAT**

### *B.6.1 Parameterestimer*

Optimeringen af modellen resulterede i parameterestimerne vist i tabel 5, hvor lineære 95%-konfidensintervaller (Hill, 1998) også er opført. De optimerede parametre er generelt behæftet med en relativ lille usikkerhed. Den hydrauliske ledningsevne for kvartssand er dog en undtagelse, idet denne parameter kan variere næsten en dekade indenfor konfidensintervallet. Den relativt store usikkerhed ses illustreret i figur 5, hvor der foruden parameterestimer med tilhørende usikkerhed også er plottet de initiale parameterværdier og de fysisk plausible grænser for hver parameter (se tabel 4). Igen ses den hydrauliske ledningsevne for kvartssand at afvige fra det generelle billede, idet den estimerede værdi falder udenfor det vurderede realistiske interval. Både det brede konfidensinterval og det lave estimat af ledningsevnen indikerer, at pålideligheden af estimatet for kvartssandets ledningsevne er ringe. Det kan skyldes problemer med parametriseringen, lav model-sensitivitet overfor parameteren, manglende eller fejlbehæftede trykniveauobservationer fra områder, hvor bjergarten optræder, m.m. Der er ikke foretaget en detaljeret analyse af problemet for nærværende.

**Tabel 5** Resultater fra den inverse optimering: Parameterestimer, 95% konfidensinterval (K.I.), samt maksimal parameterkorrelation. Enheden for hydraulisk ledningsevne (KH) og lækagekoefficient (LK) er hhv. m/s og s<sup>-1</sup>.

Parameter nr.	1	2	3	4	5	6	7
Parameternavn	KHss	KHml	KHks	KHgs	KHgl	LKlav	LKhøj
Øvre 95% K.I.	2.2·10 <sup>-4</sup>	2.8·10 <sup>-6</sup>	1.0·10 <sup>-4</sup>	2.6·10 <sup>-4</sup>	9.3·10 <sup>-8</sup>	2.9·10 <sup>-7</sup>	1.5·10 <sup>-6</sup>
Estimat	1.9·10 <sup>-4</sup>	1.9·10 <sup>-6</sup>	3.7·10 <sup>-5</sup>	1.3·10 <sup>-4</sup>	4.8·10 <sup>-8</sup>	1.9·10 <sup>-7</sup>	1.1·10 <sup>-6</sup>
Nedre 95% K.I.	1.7·10 <sup>-4</sup>	1.3·10 <sup>-6</sup>	1.4·10 <sup>-5</sup>	7.9·10 <sup>-5</sup>	2.5·10 <sup>-8</sup>	1.2·10 <sup>-7</sup>	8.3·10 <sup>-7</sup>
Maks. korrelation (med param. nr.)	-0.57 (# 2)	-0.57 (# 1)	-0.51 (# 4)	-0.51 (# 3)	-0.31 (# 2)	-0.14 (# 2)	-0.08 (# 4)



**Figur 5** Initiale parameterverdier anvendt i optimeringen, parameterestimer, konfidensintervaller og realistiske grænser for parametrene.

Problemet med urealistiske parameterestimer kan afhjælpes, hvis objektiv funktionen udvides med en såkaldt “penalty function”, hvor afgivelsen mellem et a priori estimeret af parameteren og optimeringsrutinens parameterestimat adderes til de andre residualer. Det kan imidlertid være vanskeligt at bestemme en hensigtsmæssige a priori værdi (bl.a. pga. skalaeffekter), og samtidig vil denne fremgangsmåde resultere i en dårligere overensstemmelse mellem observeret og simuleret tilstandsvariabel. Metoden er derfor ikke anvendt i det aktuelle tilfælde.

For de øvrige parametre gælder generelt, at deres værdi ændrer sig i forhold til det initiale estimat, samt at både størrelsen af konfidensintervallet og parameterestimatets absolutte værdi indikerer troværdige resultater. Det ses af tabel 5, at den maksimale korrelation mellem to parametre er på -0.57 (mellem den hydrauliske ledningsevne for smeltevandssand og moræneler), hvilket viser, at parameterkorrelation ikke er noget problem for modellen.

### B.6.2 Kalibreringsresultat

Optimeringsresultatet målt i overensstemmelse mellem observerede og simulerede værdier af trykniveau og vandføring blev: G (lign. 6) = 1760; SE (lign. 5) = 1.19; R<sup>2</sup> = 0.92. Resultatet opfylder kalibreringskriteriet på SE < 2, og det overordnede simuleringsresultat er derfor acceptabelt. Det er imidlertid ikke muligt på baggrund af ovenstående mål at vurdere, hvordan hhv. hydraulisk

trykniveau og grundvandstilstrømning simuleres. I tabel 6 er overensstemmelsen for de to tilstandsvariable opført. I det efterfølgende foretages en vurdering af de respektive simuleringresultater, ligesom den rumlige fordeling af residualerne for de to tilstandsvariable er analyseres.

**Tabel 6** Overensstemmelse mellem observeret og simuleret trykniveau og grundvandstilstrømning.

Variabel	ME	RMS	ME/ $\Delta H$	RMS/ $\Delta H$
Hydraulisk trykniveau, h	-0.4 m	5.2 m	-0.6%	7%
Grundvandstilstrømning, Q	17%	57%	-	-

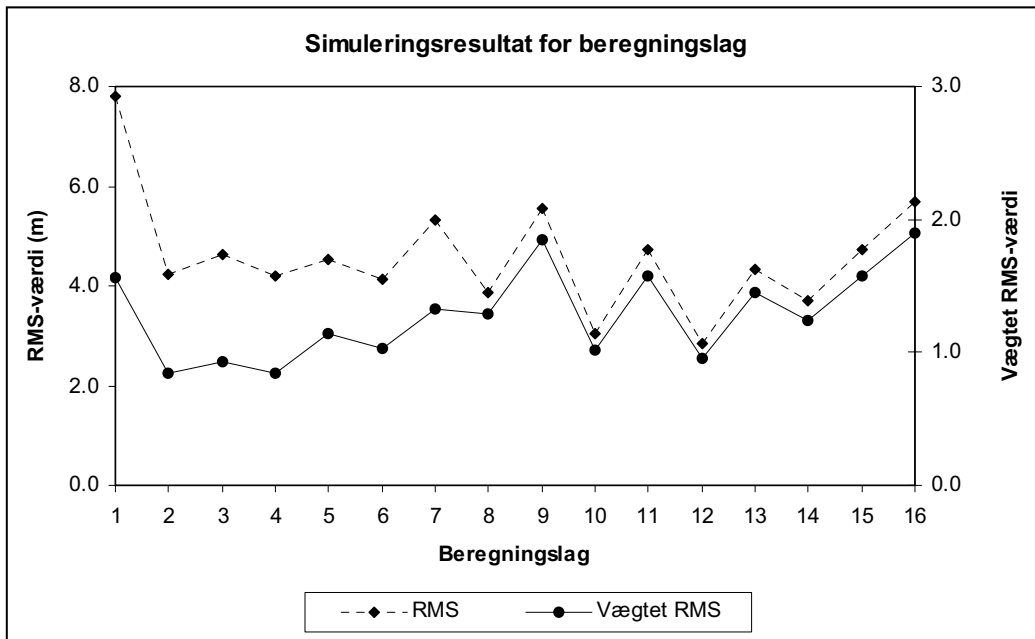
### B.6.3 Hydraulisk trykniveau

Kalibreringsresultatet for hhv. hydraulisk trykniveau og grundvandstilstrømning fremgår af tabel 6. Trykniveauet simuleres i gennemsnit en anelse for højt (40 cm), men i forhold til trykniveauvariationen i området ( $\Delta H = 70$  m), er den samlede fejl stort set elimineret. Spredningen på det simulerede trykniveau i forhold til det observerede er (udtrykt ved RMS-værdien) på 5.2 m. Da forholdet RMS/ $\Delta H$  er på 7% og derved mindre end kalibreringskriteriet på 10%, vurderes præcisionen at være acceptabel.

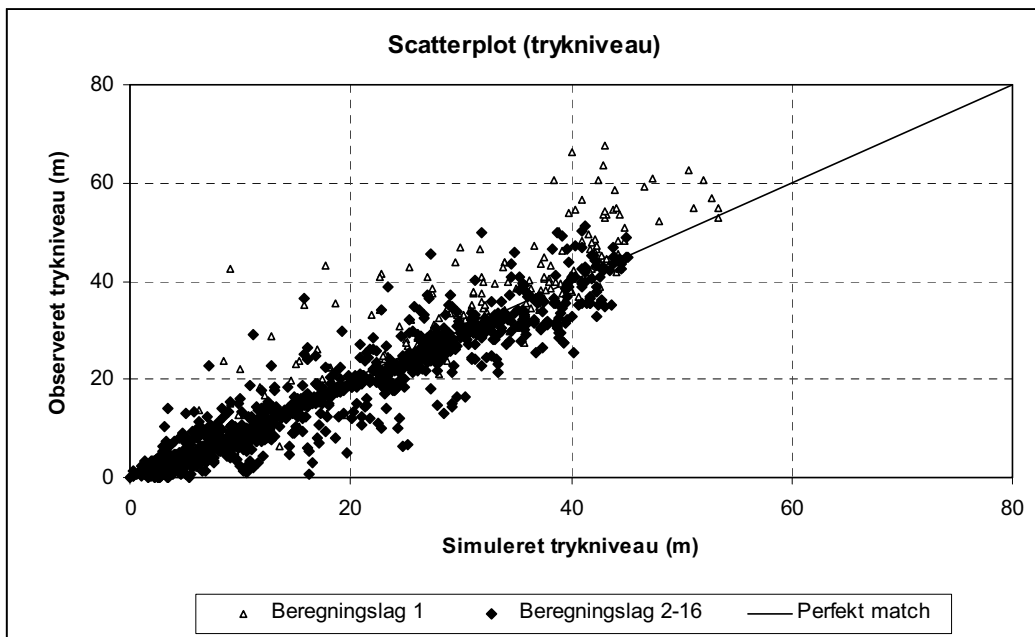
I figur 6 ses hhv. RMS-værdien og RMS-værdien skaleret med standardafvigelsen på trykniveauobservationerne (vægtet RMS-værdi) for hvert af de 16 beregningslag. RMS-værdien for beregningslag 1 skiller sig ud fra de øvrige, idet der her opnås en værdi på næsten 8 m. Denne store spredning skyldes, at beregningslag 1 specielt i den østlige del af Sønderjylland er meget tyk (over 30 m, Christensen et al., 2000). Selv hvis højtliggende sekundære magasiner er beskrevet af den geologiske model, vil det pga. midlingen over den samlede lagtykkelse ikke være muligt at beskrive sådanne magasiner med efterfølgende simulering af for lavt trykniveau. Problemet kan ses på figur 7, der viser observeret mod simuleret trykniveau. Der ses at være en relativ dårlig overensstemmelse for lag 1, hvor trykniveauet generelt underestimeres, specielt for høje trykniveauværdier. For de øvrige beregningslag er både fordelingen af RMS-værdierne (figur 6) og overensstemmelsen mellem simuleret og observeret trykniveau (figur 7) acceptabel.

Hvis de vægtede afvigelser betragtes, fremtræder den dårlige simulering af trykniveauet i beregningslag 1 mindre markant, da trykniveauobservationerne i lag 1 er tillagt en relativ stor usikkerhed (se tabel 1). Både de vægtede RMS-værdier (figur 6) og de vægtede residualer (figur 8) udviser en forholdsvis pæn fordeling som funktion af hhv. beregningslag og simuleret trykniveau. Residualerne i figur 8 ses at fordele sig ligeligt omkring 0.0, og deres størrelse er uafhængige af det simulerede trykniveau. Desuden ses størstedelen af de vægtede residualer at ligge i intervallet  $\pm 2$  og kun få værdier falder udenfor  $\pm 4$ . Statistisk set er der derfor ikke grund til at reformulere den anvendte model.

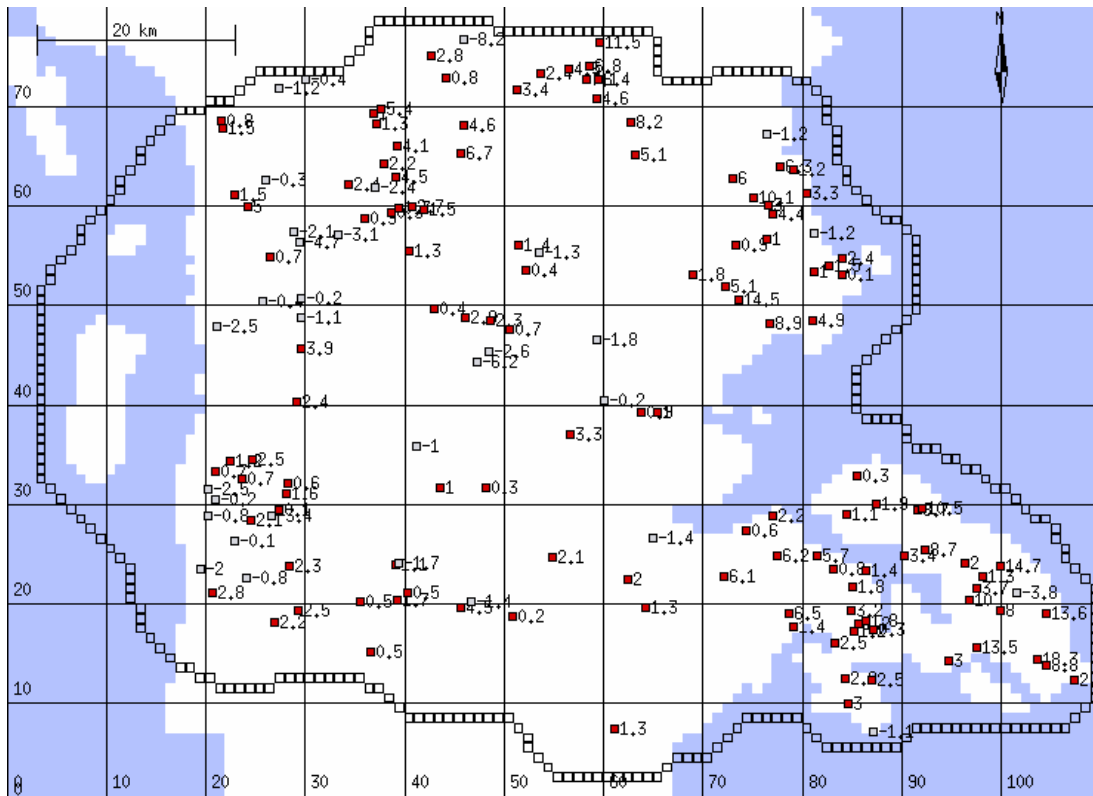
Den rumlige fordeling af residualerne er generelt også rimelig. Som eksempel er residualerne for beregningslag 5 vist i figur 9. I den østligste del af modelområdet (på Als) ses en tendens til systematisk underestimation af trykniveauet, mens der i det øvrige område er en acceptabel fordeling af residualerne.



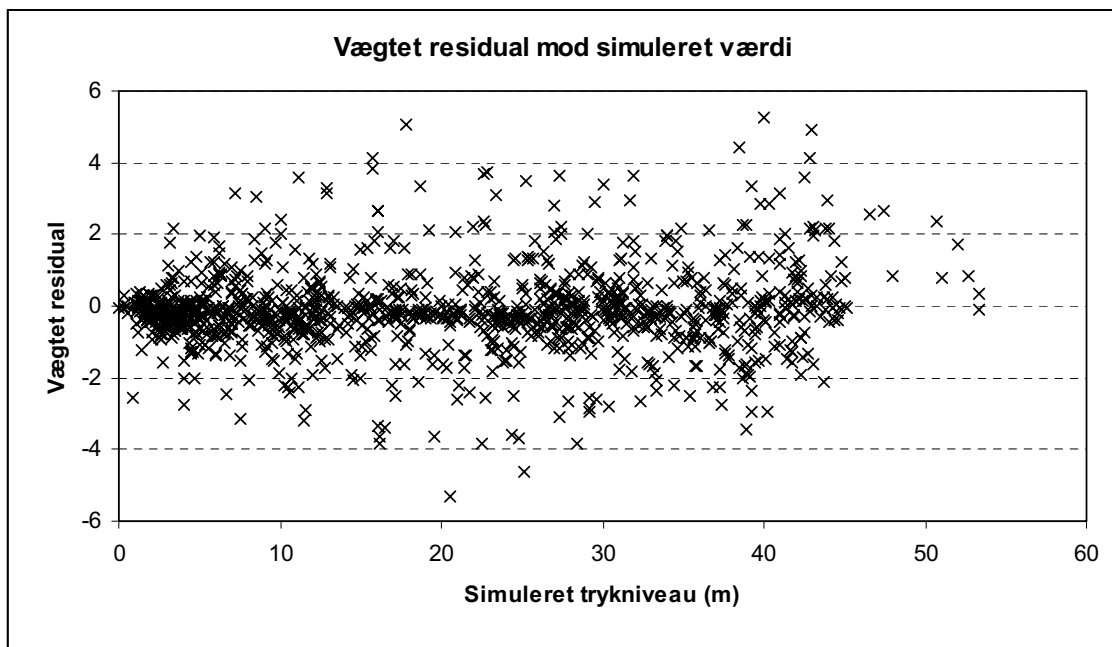
Figur 6 RMS-værdi for de enkelte beregningslag og RMS-værdi normeret med standardafvigelse for det pågældende beregningslag (se tabel 2).



Figur 7 Scatterplot af observeret trykniveau mod simuleret trykniveau.



**Figur 8** Residualplot af vægtede afvigelser mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau mod simuleret trykniveau.



**Figur 9** Residualer ( $h_{obs} - h_{sim}$ ) i beregningslag 5.

#### B.6.4 Grundvandstilstrømning til vandløb

Grundvandstilstrømningen til vandløbene underestimeres i gennemsnit 17% (tabel 6) og spredningen på den relative afvigelse mellem observeret og simuleret grundvandstilstrømning er 57%. Dermed er kriteriet for både ME og RMS overskredet med næsten en faktor to. Det kan muligvis skyldes, at der er stillet for skrappe krav til simulering af grundvandstilstrømning. Det er forholdsvis vanskeligt at opstille kvantitative kalibreringskriterier for grundvandstilstrømningen, dels fordi der mangler erfaringsværdier på området, dels fordi medianminimum kan variere over flere deka-der (i nærværende tilfælde fra 35 til 3400 l/s). Der vurderes imidlertid, at de opstillede kalibreringskrav er fysisk realistiske.

De relativt store ME- og RMS-værdier afspejler til dels, at de 22 medianminimumsværdier udgør en meget lille del af det samlede datasæt på 1243 observationsværdier. Desuden kan optimeringsalgoritmen ikke skelne mellem forskellige datatyper såsom hydraulisk trykniveau og grundvandstilstrømning, og vil derfor søge en løsning, der eksempelvis resulterer i en samlet ME tæt på 0.0, uanset om resultatet indebærer en overestimation af trykniveauet og underestimation af grundvandstilstrømningen (som det er tilfældet her).

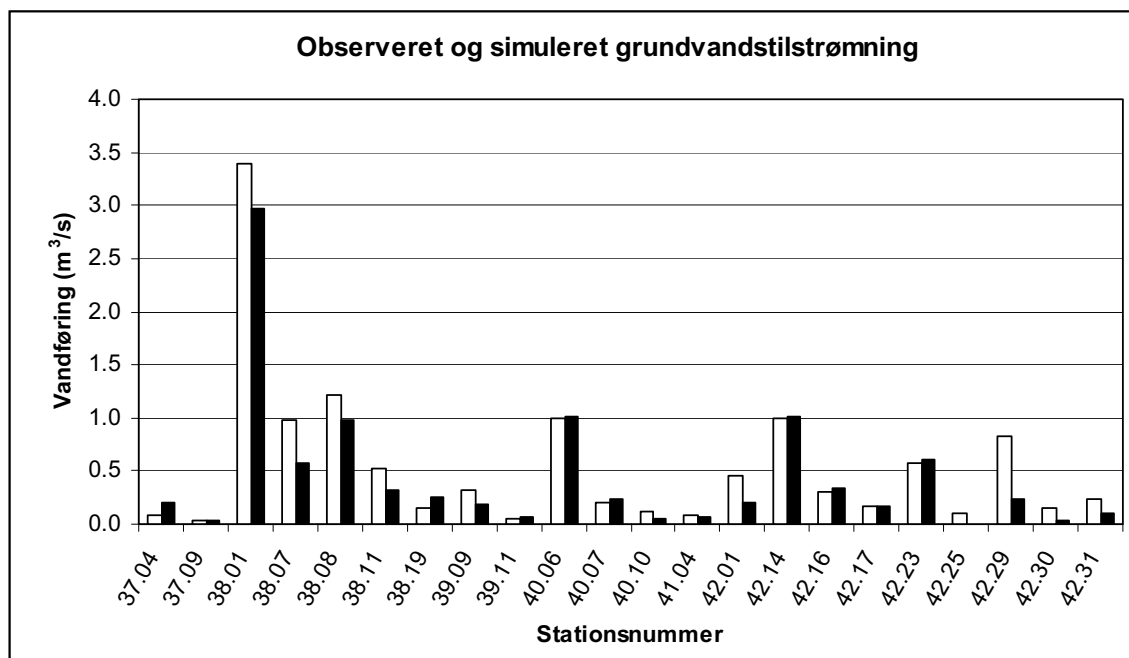
Der simuleres generelt for lav grundvandstilstrømning til vandløbene (jf. ME = 17%). For station 42.25 simuleres der desuden en beskeden udstømning fra vandløbet til grundvandsmagasinet. Begge resultater kan til en vis grad tilskrives simuleringen af for lave trykniveauer i de tilgrænsende magasiner. Som vist i afsnit 6.3 simuleres trykniveauet i beregningslag 1, hvor de fleste vandløb er lokaliseret, relativt dårligt, og det får indflydelse på simulering af grundvandstilstrømningen til vandløbene.

Fordelingen af den relative afvigelse for hver vandføringsstation ses på figur 10. Specielt for station 37.04 og 42.25 optræder der store afvigelser (> 100%). Den observerede vandføring er imidlertid forholdsvis lav for begge stationer, se tabel 2 og figur 11, og det er derfor ikke overraskende, at modellen har svært ved at reproducere grundvandstilstrømningen med høj præcision. For stationerne med størst opland og vandføring (38.01, 38.08, 40.06, 42.14) ses en rimelig overensstemmelse mellem observeret og simuleret grundvandstilstrømning. Modellen er altså i stand til at reproducere den samlede grundvandsstrømning til vandløbene acceptabelt.



Figur 10 Relativ afvigelse på grundvandstilstrømning for de 22 vandføringsstationer, hvor medianminimumsværdier er anvendt i kalibreringen.

En mere detaljeret distribuering af vandløbslækagekoefficienten vil sandsynligvis resultere i en bedre simulering af grundvandstilstrømningen. Det er imidlertid usikkert på hvilket grundlag distribueringen i givet fald skal foretages. Det ligger udenfor rammerne af dette arbejde at gennemføre en analyse af den karakter, og der er derfor ikke foretaget en yderligere distribuering af parameteren.



**Figur 11** Observeret (□) og simuleret (■) grundvandstilstrømning ved de 22 vandføringsstationer.

## B.7 KONKLUSION

En invers procedure baseret på en stationær version af MIKE SHE og optimeringsprogrammet UCODE er udviklet og afprøvet i forbindelse med kalibrering af DK-model Sønderjylland. Arbejdet viser, at det er muligt at udføre invers kalibrering af den regionale Danmarksmode. Distribuerede fordelinger af hydraulisk ledningsevne og vandløbslækagekoefficient er estimeret på baggrund af observationer af hydraulisk trykniveau og medianminimumsvandføring.

Den inverse kode er først anvendt til identifikation af modelfølsomme parametre, og denne information er benyttet til udvælgelse af parametre, der skal inkluderes i optimeringen (kalibreringsparametre). Efterfølgende er den inverse model anvendt til estimation af kalibreringsparametrene, som bestod af fem hydrauliske ledningsevner og to vandløbslækagekoefficienter.

Den inverse løsning er generelt tilfredsstillende både mht. parameterestimer og simuleringresultater. For seks ud af syv parametre bestemmes der realistiske parameterestimer med relativ lille usikkerhed. Den resulterende overensstemmelse mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau er for størstedelen af grundvandsmagasinerne tilfredsstillende og opfylder de opstillede kalibreringskriterier uden problemer.

Der er identificeret to problemer med den fundne løsning: (1) Estimatet af hydraulisk ledningsevne for en af de definerede geologiske enheder (kvartssand) falder udenfor, hvad der er vurderet som værende et realistisk interval. Desuden er usikkerheden på denne parameter betydelig. (2) Pga. numeriske hensyn er modellens øverste beregningslag stedvist meget tyk, hvilket giver anledning til midling af forskellige geologiske enheders hydrauliske egenskaber. Den dårlige opløsning af de terrænnære jordlag resulterer efterfølgende i en relativ dårlig overensstemmelse mellem observeret og simuleret hydraulisk trykniveau i det øverste beregningslag. Problemet påvirker også simuleringen af grundvandstilstrømning til vandløbene, idet en utilfredsstillende beskrivelse af trykniveau-

fordelingen i de magasiner, hvor vandløbene er lokaliseret, resulterer i en ringe beskrivelse af grundvandsstrømning til/fra vandløbene. Der er derfor ikke opnået resultater mht. grundvandstilstrømningen til vandløbene som opfylder kalibreringskriterierne. Det vurderes alligevel, at resultatet er acceptabelt på dette trin i udviklingen af modellen, som efterfølgende vil omfatte en manuel ikke-stationær kalibrering af modellen, hvor primært magasinkoefficienter og drænvandskoefficienter skal estimeres.

## B.8 REFERENCER

Christensen, B.S.B., Henriksen, H.J., Nyegaard, P. (2000) Status for arbejdet med DK-model Jylland. <http://www.vandmodel.dk/jylland.htm>, GEUS.

Dahl, M., Harrar, W.G., Henriksen, H.J., Knudby, C.J. (1998) Integrated hydrological modelling of freshwater resources in Denmark – Distribution of aquifer-river exchange parameters. In: *Gambling with Groundwater – Physical, Chemical, and Biological Aspects of Aquifer-Stream Relations*, Brahana et al. (eds.), 607-616.

Hansen, M. (1997) GridGym ver. 0.9h, GEUS.

Harrar, W., Henriksen, H.J. (1996) Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted Å aquifer system: Setup and calibration. Unpublished report. GEUS.

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

Henriksen, H.J., Troldborg, L., Knudby, C.J., Dahl, M., Nyegaard, P., Jacobsen, P.R., Rasmussen, P. (1998) National vandressource model. Sjælland, Lolland, Falster og Møn. GEUS undersøgelses rapport 1998/109.

Hill, M.C. (1998) Methods and guidelines for effective model calibration. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005, Denver, Colorado, USA.

PALAEAUX (1999), Management of coastal aquifers in Europe. Palaeowater, natural controls and human influence, EU fourth framework programme, Final report, June 1999.

Poeter, E.P. and Hill, M.C. (1998) Documentation of UCODE: A computer code for universal inverse modeling, U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4080, Denver, Colorado, USA.

Ribe Amt (1994) Afstrømningsmålinger 1993, Ribe Amt, Vandløbskontoret.

Sønderjyllands Amt (1996) Afstrømningsmålinger 1995 i Sønderjyllands Amt, Miljø- og vandløbsvæsenet, Teknisk Forvaltning.