

Kapitel 19 METODER TIL USIKKERHEDSVURDERING

Anker Lajer Højberg
Hydrologisk afdeling, GEUS

Jens Christian Refsgaard
Hydrologisk afdeling, GEUS

Nøglebegreber: Identificering og karakterisering af usikkerhed, strategi og metoder til usikkerhedsanalyse.

ABSTRACT: Grundvandsmodeller anvendes rutinemæssigt af vandressourceforvaltere som arbejdsredskab i ressourceplanlægning og modelresultaterne vægter ofte tungt i en beslutningsproces, f.eks. i forbindelse med indsatsplanlægning. Der bliver således truffet afgørelser om eksempelvis dyrkningsaftaler, der i høj grad beror på modelsimuleringer. Dette stiller store krav til modellens troværdighed, der først og fremmest skal sikres gennem et fagligt højt niveau for modelopgavens udførelse samt systematisk kvalitetssikring af arbejdet. Men selv ved en ulastelig udført modelopgave vil simuleringerne være forbundet med usikkerhed. Det er vigtigt at usikkerheden om muligt kvantificeres, og inddrages i en beslutningsproces, så beslutningsgrundlaget inklusiv usikkerheden er kendt. Indenfor de senere år er der kommet stor fokus på usikkerhedsvurdering i forbindelse med anvendelse af grundvandsmodeller og stort set samtlige modelopgaver der udbydes i dag indeholder et krav om en usikkerhedsvurdering. Modeller er imidlertid ofte meget komplekse i opbygningen, hvor forskellige usikkerhedskilder influerer forskelligt og i varierende omfang på det endelige modelresultat. En usikkerhedsvurdering er derfor en meget kompleks opgave, der kræver stor omhu ved udførelsen. I dette kapitel gives der først en karakterisering af usikkerheder efterfulgt af en oversigt over de forskellige usikkerhedskilder, deres oprindelse og betydning. Derefter gives et forslag til en strategi for håndtering af usikkerheder under et projektforsøg for grundvandsmodellering, og endelig gives en kort beskrivelse af forskellige metoder der kan anvendes til belysning af en usikkerheds betydning for modelresultatet.

19.1 INDLEDNING

Grundvandsmodeller er grundlæggende opbygget ud fra den filosofi, at vi er istand til observere de fysiske processer som forekommer i naturen, og samtidig er istand til at beskrive disse processer ved hjælp af matematiske udtryk og implementere dem i (numeriske) modeller. Fysiske systemer er imidlertid meget komplekse med stor grad af heterogenitet og mange indgående processer med indbyrdes interaktion. Dette stiller store krav, både mht. at få analyseret systemerne og efterfølgende at få dem beskrevet i de anvendte modeller. Det vil dog aldrig være muligt at observere de fysiske systemer komplet, ligesom det ikke er muligt at opstille numeriske modeller, der beskriver det fysiske system ned til mindste detalje. Under modelarbejdet er det derfor nødvendigt, at foretage nogle valg/fravalg mht. hvilke faktorer og processer der medtages og hvordan de beskrives. Alle modeller er således en simplificering af naturen og vil derfor altid være en tilnærmelse og modeller vil uvægerlig være forbundet med usikkerhed. Det at en model er usikker er i sig selv ikke en diskvalificering for anvendelse af resultaterne, det er først diskvalificerende i det øjeblik usikkerheden ikke erkendes og inddrages ved tolkningen af modelresultaterne.

Usikkerhedskilderne er mangfoldige og den store udfordring ligger i at erkende samtlige kilder, vurdere deres betydning og efterfølgende forsøge at kvantificere deres betydning. Indenfor den akademiske verden har der traditionelt været fokus på den del af usikkerheden der skyldes usikker-

heden på modelparametrene, og der er udviklet mange standardiserede metoder til kvantificering af netop dette bidrag til usikkerheden. Parameterusikkerheden er imidlertid kun ét af bidragene til den samlede usikkerhed. Eksempelvis vil der altid være usikkerhed mht. den opstillede konceptuelle model, f.eks. fejlagtig repræsentation af randbetingelser eller forkert struktur i den hydrogeologiske model. Konceptuel usikkerhed er først rigtigt kommet i fokus indenfor de senere år, og der er endnu ikke udviklet nogen formaliseret metode til, hvordan denne type usikkerhed kan håndteres. Der er således heller ikke nogen formel accepteret metode til analyse af den samlede model usikkerhed.

De mange usikkerhedskilder samt fraværet af generelt accepterede metoder gør usikkerhedsvurdering til en meget vanskelig disciplin. Ethvert modelleringsjob er unikt mht. både de fysiske forhold (geologi, hydrologi, processer, mv.) samt formålet med modelleringen (ressourcevurdering, vurdering af indvindingsstrategi, forureningsudbredelse, o.s.v.). Forskellige modeljobs vil typisk være associeret med forskellige usikkerhedskilder, ligesom betydningen af de enkelte usikkerhedskilder vil variere fra projekt til projekt. En velegnet metode til belysning af usikkerheden i ét modeljob vil således ikke nødvendigvis være optimal i andre projekter. Det er derfor nødvendigt at en usikkerhedsvurdering indledes med en analyse af hvilke usikkerhedskilder der eksisterer og i hvor høj grad de forventes at influere på model resultatet. Herefter udarbejdes en strategi, der sikrer at de bedste metoder udvælges, og at usikkerhedsaspektet inddrages i de relevante step i modelleringsprocessen. Har man først identificeret usikkerhederne er det optimale selvfølgelig at forsøge at reducere disse, f.eks. ved en målrettet monitorings/prøvetagnings kampagne. Men usikkerhederne vil aldrig kunne overkommes helt, og det vil derfor altid være nødvendigt med en vurdering af hvilken betydningen usikkerhederne har for det endelige modelresultat. I dette kapitel fokuseres der på hvordan denne usikkerhed kan håndteres og forsøges kvantificeret, når det ikke er muligt at reducere usikkerheden yderligere.

19.2 DEFINITION AF USIKKERHED

Før vi starter med at beskrive strategier for hvordan usikkerhederne i forbindelse med modelsimuleringer kan håndteres, er det relevant med en kort definition af usikkerheder. I den perfekte situation er alle størrelser kendt eksakt (determinisme), dvs. uden nogen usikkerhed. Denne situation er ønskværdig men uopnåelig, da enhver målemetode vil være behæftet med usikkerhed. I praksis er der imidlertid tilfælde, hvor det godt kan give mening at operere med determinisme, et eksempel herpå kan være indvindingsmængder. Foreligger der gode indvindingsdata, mht. placering af filtre og indvindingsmængder (ved anvendelse af dykpumper), vil usikkerheden på en indvinding i en størrelsesorden af 100.000 m³/år være meget lille, og ofte kunne negligeres i den samlede usikkerhedsvurdering. I dette tilfælde tror vi altså tilstrækkeligt på data til, at vi ikke overvejer en usikkerhedsvurdering.

Viser det sig imidlertid at de faktiske forhold afviger signifikant fra de data der er indlagt i modellen, så skyldes det fejl i datasættet. Dette kan f.eks. skyldes fejl under indtastning i den originale database eller når data indlægges i den numeriske model. Konsekvensen er, at der er introduceret fejl i vores model, som kan have væsentlig betydning for modelresultaterne. Men medmindre fejlen resulterer i åbenlyse fejl i modelresultaterne, er der stor risiko for at fejlen ikke opdages, og betydningen heraf på modelresultatet bliver altså heller ikke kvantificeret. Det kan altså give mening at skelne mellem fejl og usikkerhed. Når noget er usikkert er vi bevidste om at vi ikke kender den eksakte størrelse, men vi er ikke istand til at nærme os den sande størrelse yderligere. Usikkerhed er altså en stokastisk størrelse, der i bedste fald kan kvantificeres. Fejl derimod er en deterministisk størrelse, fejl optræder når vi har en mulighed (i hvert fald teoretisk) for, at dokumentere at noget er forkert. I eksemplet om indvinding fra før er det f.eks. muligt at opdage, hvis en boring eller indvindingsmængde er indlagt forkert ved en systematisk kontrol af data. Når vi snakker troværdighed af modeller vil såvel fejl som usikkerheder spille ind på modelresultatet. Hvordan vi kan håndtere usikkerheden er skitseret nedenfor, hvorimod fejl i form af fejlagtig modelopsætning, kun kan håndteres ved en grundig kvalitetssikring, som beskrevet i kapitel 23.

Usikkerhed inkluderer såvel objektive som subjektive aspekter. De subjektive aspekter afspejler, at forskellige personer kan have forskellige tiltro eller mistro til forskellige størrelser eller informationer. Der kan f.eks. være forskel i hvor godt man mener en given proces er beskrevet i den numeriske model, og dermed forskel i hvor troværdig man mener modelsimuleringerne er. I Refsgaard et al. (2005) er der givet følgende definition af usikkerhed

Definition (usikkerhed): En person er usikker hvis han/hun ikke har tiltro til de specifikke udfald af en hændelse eller handling. Årsagerne til den manglende tiltro kan inkludere en vurdering af informationerne som værende ikke-komplette, slørede, ukorrekte eller muligvis forkerte eller kan reflektere intrinsisk begrænsninger i den deterministiske repræsentation af komplekse systemer eller stokastiske processer.

19.3 KARAKTERISERING AF USIKKERHEDEN

For at kunne vælge en optimal metode til at vurdere betydningen af de enkelte usikkerhedsbidrag i forbindelse med modelsimulering, er det givtigt først at få usikkerheden karakteriseret. Dvs. identificere hvilke usikkerhedskilder der er tale om, hvor i modelopgaven de optræder, hvilke muligheder man har for at reducere usikkerheden og endelig i hvilken udstrækning det er muligt at kvantificere den del af usikkerheden, der ikke kan reduceres yderligere. Walker et al. (2003) foreslår en karakterisering af usikkerheden i tre dimensioner

1. Usikkerhedskilde - hvor i modellen optræder usikkerheden.
2. Niveau af usikkerhed - hvor stort kendskab har vi til usikkerheden.
3. Usikkerhedens natur - skyldes usikkerheden huller i vores viden, eller skyldes den naturlig variation.

Denne opdeling kan være nyttig i kommunikationen omkring usikkerhed, så det i højere grad står klart for de involverede parter (vandressourceforvalter, modellører og evt. interessenter) hvad der menes med usikkerhed og hvordan betydningen heraf kan vurderes. Den følgende karakterisering af usikkerheden følger løseligt definitionerne givet af Walker et al. (2003).

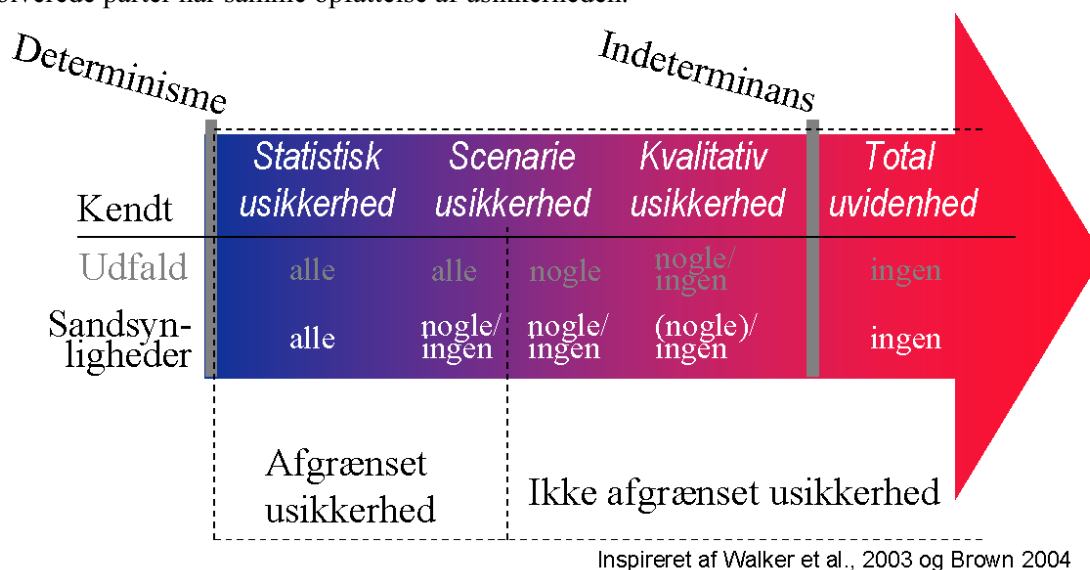
19.3.1 Usikkerhedskilde

Første led i en usikkerhedsanalyse er identifikation af hvor usikkerhederne optræder. Der kan grundlæggende identificeres to niveauer af usikkerheder i forbindelse med anvendelse af modeller. Det ene niveau omhandler de usikkerheder der er forbundet med den tekniske løsning af et modeleringsjob, hvorimod det andet niveau relaterer sig selve beslutningsprocessen i forbindelse med en vandforvaltningsopgave. Beslutningsprocessen varetages af vandressourceforvalteren og omhandler bl.a. identifikation af problemet (f.eks. grundvandets sårbarhed overfor nedsvivende stoffer) og hele det politiske spil med involvering af interessenter og afdækning af deres præferencer og behov. Selve modelleringen indgår som et arbejdsredskab i hele denne proces, og det er kun usikkerheder i forbindelse med den tekniske løsning af modelleringen og selve anvendelsen af modellen der beskrives i dette kapitel.

Med denne indsnævring af usikkerhedsfeltet har vi to overordnede kilder til usikkerheden. Den første gruppe af usikkerhedskilder er associeret med selve modellen og relateret til den konceptuelle model, den numeriske model og opstillingen af denne, kalibreringen, de anvendte data etc.. Udover denne gruppe af usikkerheder har vi en anden kilde til usikkerhed relateret til anvendelse af modellen til scenario (management) simuleringer. Her optræder der usikkerhed i forbindelse med de grundlæggende antagelser vi gør om fremtidige forhold. Traditionelt omhandler en usikkerhedsvurdering kun den første gruppe af usikkerheder, dvs. de usikkerheder der er relateret direkte til modellen. Men da formålet med opstillingen af en grundvandsmodel i de fleste tilfælde er at kunne give et bud på en fremtidig situation under ændrede forhold, er det vigtigt også at inddrage usikkerheden netop mht. de fremtidige forhold. Som oplagt eksempel kan nævnes de fremtidige klimaforhold. De enkelte usikkerhedskilder beskrives mere detaljeret i afsnit 19.4

19.3.2 Niveau af usikkerhed

Niveauet for usikkerheden relaterer sig til, hvor godt vi er i stand til at beskrive og kvantificere usikkerheden, eller måske mere korrekt, hvor stor tillid vi har til vores viden omkring en given usikkerhedskilde. Man skal gøre sig klart, at usikkerhed i meget høj grad er en subjektiv størrelse. Beder man f.eks. forskellige eksperter komme med et bud på en størrelse samt mulig variationsinterval for en bestemt variabel, vil man få ligeså mange svar som personer man spørger. Vi kan blot tænke på bestemmelse af nettonedbøren, der praktisk talt diskuteres ved enhver modelopstilling. Der er næppe nogen der tvivler på, at den estimerede nettonedbør er behæftet med usikkerhed, men hvor stor denne usikkerhed er, vil der være delte meninger om. I dette tilfælde er det hverken muligt at estimere den sande nettonedbør eller den sande størrelse af usikkerheden på nettonedbøren. Vi må derimod søge at opnå en konsensus omkring en fornuftigt størrelse for usikkerheden, en konsensus der opnås gennem kvalificeret faglig diskussion, og som efterfølgende sikrer, at de involverede parter har samme opfattelse af usikkerheden.



Figur 19.1 Karakterisering af usikkerhed baseret på vores tillid til vores viden

Ifølge Walker et al. (2003) eksisterer der et helt spektrum af grader af vores kendskab til usikkerheden. Dette spektrum strækker sig fra den ideelle (men uopnåelige) situation af komplet determinisme i den ene ende til total uvidenhed i den anden ende af skalaen. Usikkerheden optræder i feltet mellem de to yderpoler og kan inddeles ud fra vort kendskab til usikkerhed som illustreret i figur 19.1. Som den ene yderpol har vi determinismen. Her er alle størrelser kendte, og der er således ingen usikkerhed og følgelig ikke behov for nogen usikkerhedsanalyse. Statistisk usikkerhed omhandler enhver form for usikkerhed der kan karakteriseres statistisk, dvs. vi kender alle mulige udfald (værdier) af variabelen, samt de tilhørende sandsynligheder. Den bedst kendte form for statistisk usikkerhed i relation til grundvandsmodellering er formentlig den del af usikkerheden, der skyldes usikkerheden på modelparametrene. Fra invers kalibrering kan der f.eks. opnås et estimat for usikkerheden på modelparametrene typisk i form af 95% konfidens intervaller (se kapitel 14). På baggrund af de estimerede 95% konfidens intervaller samt en antagelse om parameterens fordeling (typisk normal eller lognormal fordeling) er fordelingsfunktionen for modelparameteren beskrevet fuldstændigt og kan tjene som input i en statistisk usikkerhedsanalyse, se afsnit 19.6. Den statistiske usikkerhedsanalyse er dog ikke begrænset til modelparametrene, men kan anvendes i ethvert tilfælde, hvor der kan opnås en fuldstændig statistisk beskrivelse af usikkerheden.

Det er imidlertid langt fra i alle tilfælde at vi har et fuldstændigt kendskab til såvel det mulige udfaldsrum samt de associerede sandsynligheder. I mange tilfælde kan vi have et godt kendskab til udfaldsrummet (f.eks. et realistisk parameterinterval) men kun ringe eller ingen kendskab til sandsynlighedsfordelingen for parameteren. Usikkerhedskilder der falder indenfor denne kategori

benævnes scenario usikkerhed. Vi har mulighed for at kvantificere den maksimale betydningen af usikkerheden på modelresultatet (f.eks. ved at anvende en parameter værdi i hver ende af intervallet) men vi har ikke mulighed for at sige noget om hvor sandsynlige disse resultater er.

Vi kan også have en situation, hvor vi er bevidste om at vi har videnshuller, altså at vi ved der er faktorer vi ikke kender. Dette betyder at vi ikke kender det fulde udfaldsrum, og derfor ikke kan afgrænse usikkerhedsintervallet. I forbindelse med usikkerhedsvurdering er dette et meget ubehageligt tilfælde, idet vi er klar over, at resultaterne er usikre pga. vore videnshuller, men vi har ingen mulighed for at kvantificere denne end ikke som "worst" eller "best" situationer, da vi ikke kan afgrænse udfaldsrummet. Denne type af usikkerheder vil oftest kun være mulig at håndtere kvalitativt, altså give kvalitative bud på usikkerhedens indflydelse på modelresultatet. I litteraturen benævnes denne type af usikkerhed ofte "erkendt uvidenhed", til forskel fra den totale uvidenhed, hvor vi end ikke er klar over at vi har videnshuller. I denne situation beskæftiger vi os slet ikke med

"...as we know, there are known-knowns; there are things we know we know; we also know there are known-unknowns; that is to say we know there are some things we do not know; but there are also unknown-unknowns; the ones we don't know we don't know."

Donald Rumsfeldt

usikkerhed da vi ikke har erkendt, at der er en usikkerhed.

19.3.3 Usikkerhedens natur

Den sidste dimension relaterer sig til den bagvedliggende årsag til usikkerheden. Her skelnes der mellem *epistemisk usikkerhed* og *stokastisk usikkerhed*. Epistemisk usikkerhed er relateret til den usikkerhed, der skyldes at vores viden ikke er perfekt. Dette kan f.eks. være et kvalitativt eller kvantitativt dårligt datamateriale, manglende kendskab og forståelse af det fysiske system, eller manglende viden om hvordan processerne bedst beskrives i en numerisk model. Stokastisk usikkerhed er usikkerheder der skyldes den naturlige variabilitet af det fysiske system. Mens det er muligt at reducere den epistemiske usikkerhed, ved supplerende data indsamling eller forskning/udvikling, er det ikke muligt at reducere den del af usikkerheden, der stammer fra den naturlige variabilitet. Ved supplerende undersøgelser vil det i nogle tilfælde være muligt at opnå en bedre karakterisering af variabiliteten, som gør det muligt at kvantificere denne type af usikkerhed bedre, men usikkerheden fra denne usikkerhedskilde kan ikke reduceres. Af denne grund benævnes de to typer også reducerbar og ikke-reducerbar usikkerhed.

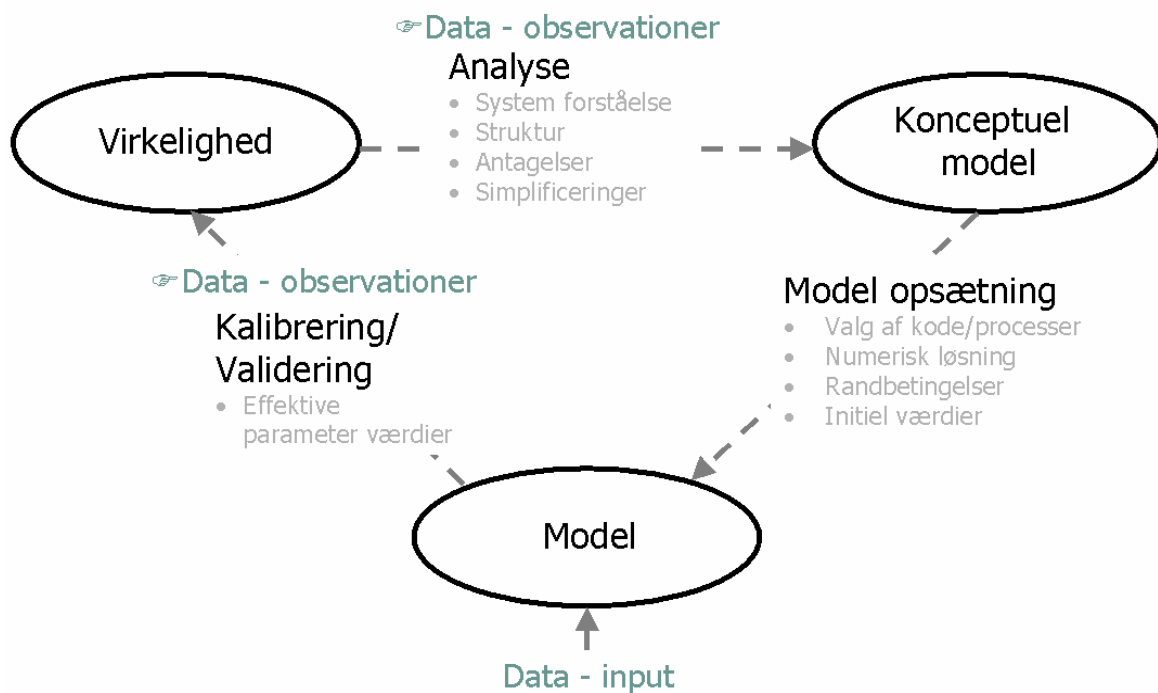
19.4 USIKKERHEDSKILDER

I afsnit 19.3.1 blev der identificeret to grupper eller lokaliteter for usikkerheden. Figur 19.2 giver en skematisk fremstilling af den første gruppe, dvs. usikkerhedskilder vedrørende modelopstilling, kalibrering/validering og data. Baseret på vores iagttagelser af virkeligheden, dvs. observationsdata, analyserer vi virkeligheden og opsætter en konceptuel model, der indeholder vores opfattelse af virkeligheden. Herefter opsættes en stedspecifik model, hvor den deskriptive konceptuelle model oversættes til en numerisk grundvandsmodel. Sidste led er kalibrering og validering af modellen, der skal sikre at vores model beskriver det betragtede system indenfor nogle prædefinerede kriterier. Samtlige af de beskrevne led indeholder usikkerhedskilder, der vil kunne forplante sig til modelresultaterne.

19.4.1 Konceptuel model

I forbindelse med opstilling af den konceptuelle model skal der foretages en række overvejelser og tolkninger som beskrevet i kapitel 4. Vores succes i forbindelse med konstruktionen af en konceptuel model afhænger selvfølgelig af det tilgængelige datamateriale, både mht. kvantitet og kvalitet, men beror i mindst lige så høj grad af vores evne til at ekstrahere informationer fra de tilgængelige data. Dvs. vi er i stand til at opnå en tilstrækkelig forståelse af systemet, mht. de fysiske processer og systemets struktur. Vi skal f.eks. være i stand til at identificere, hvilke processer der er de domi-

nerende, og hvilken interaktion der er mellem forskellige processer og betydningen heraf. Et andet springende punkt i opstilling af en konceptuel model er de hydrogeologiske forhold. Disse har vi kun en meget begrænset indsigt i fra eksempelvis borerer eller geofysisk, og vores konceptuelle geologiske/hydrogeologiske model vil derfor primært være et resultat af en tolkning. Den sparsomme information vi har omkring den geologiske struktur åbner op for udformning af et antal af mulige konceptuelle hydrogeologiske modeller. Så længe disse er i overensstemmelse med vores geologiske viden, og i øvrigt virker fornuftig ud fra kendskab til den regionale dannelseshistorie, vil de alle være sandsynlige konceptuelle modeller, og baseret på observationer alene har vi ingen mulighed for at vurdere i hvilken grad vores tolkning er korrekt. Opstilling af den konceptuelle model indbefatter ikke alene at opnå en forståelse af systemet men også at vi er istand til at simplificere og idealisere vores system, så vi kan håndtere det i en numeriske model, på en måde der er konsistent med de problemer vi ønsker at anvende modellen til at løse. Heri ligger, at vi skal være istand til at udvælge de dominerende processer og sikre at disse ikke simplificeres i en sådan grad at de ikke afspejler de naturlige processer vi ønsker at belyse. Det er således uundgåeligt at den konceptuelle model er forbundet med usikkerhed.



Figur 19.2 Skematisk fremstilling af modelleringsforløb, med angivelse af typiske usikkerhedskilder

19.4.2 Model (sted-specifik model)

Når den konceptuelle model er på plads, skal den konverteres til en numerisk model (kapitel 6). Dette betyder i første omgang, at der skal foretages et valg af, hvilken kode og evt. hvilken GUI (graphical user interface) der skal anvendes. Ved valg af kode er det oplagt at vælge en kode der kan håndtere samtlige processer identificeret i den konceptuelle model og i samme detaljeringsgrad. Dette er imidlertid ikke altid muligt eller er i konflikt med andre interesser, f.eks. ønsket om anvendelse af en bestemt kode og GUI. I nogle tilfælde vil der være god ræson i at bibeholde en velkendt kode fremfor at vælge en ny ukendt kode med en bedre procesbeskrivelse. Det der vindes ved en bedre procesbeskrivelse i form af et mere korrekt modelresultat kan sættes over styr fordi modelkoden er ukendt for modelløren, hvorved der er større risiko for at der sker fejl under model opsætningen. Er modelkoden og/eller GUI'en ligeledes ukendt for vandressourceforvalteren, er der

risiko for at modellen ikke anvendes så aktivt i beslutningsprocessen som oprindeligt ønsket. Generelt bør det dog tilstræbes, at der vælges en kode der er istand til at beskrive de identificerede processer i den ønskede detaljegrad. Fraviges dette, skal det tages i mente som en ekstra usikkerhedskilde, der kan påvirke det endelige simuleringresultat.

I en numeriske model repræsenteres det fysiske system vha. et sæt af partielle differentiaalligninger der løses numerisk ved anvendelse af en given numerisk løser (solver), som beskrevet i kapitel 8. Jo strengere konvergenzkriterium der opstilles, jo tættere vil den numeriske løsning være på den sande løsning. I praksis vil løsningen dog altid kun være tilnærmelsesvis, idet der vil forekomme afrundingsfejl og numeriske fejl på grund af computerens maskinpræcision. For langt de fleste modelopgaver vil disse to fejlkilder dog være uden praktisk betydning, og antages det, at der ikke er fejl i modelkoden, dvs. at denne er verificeret for de forhold den anvendes under (Kapitel 6), vil fejl i den numeriske løsning som regel kunne styres ved anvendelse af et tilstrækkeligt strengt konvergenzkriterium. Der kan dog forekomme endnu en type af fejl i forbindelse med den numeriske løsning, der hænger nøje sammen med den valgte diskretisering (kapitel 8). Jo grovere diskretisering der anvendes jo dårligere vil heterogeniteten i eksempelvis den hydrauliske ledningsevne kunne opløses. En finere diskretisering er således at foretrække da den giver mulighed for en mere korrekt gengivelse af de hydrogeologiske forhold og dermed en forventelig mindre usikkerhed. Benyttes grundvandsmodellen kun til belysning af strømningsforholdene er det tilstrækkeligt med en rumlig diskretisering der netop kan opløse de hydrogeologiske enheder der er identificeret i den konceptuelle model, og der opnås ikke et mere korrekt resultat ved en finere diskretisering, som for eksempel opdeling af et samlet magasin i to beregningslag. Omvendt forholder det sig med transport og partikelbane simuleringerne (kapitel 18), hvor en finere diskretisering i såvel rum og tid generelt fører til et mere korrekt beregningsresultat.

Da modeller ikke har uendelig udstrækning i rummet er det nødvendigt at definere modelområdets samspil med omgivelserne gennem valg af ydre modelrandbetingelser, ligesom indre randbetingelser skal specificeres (kapitel 7). Ideelt bør de ydre randbetingelser placeres så de er sammenfaldende med naturlige hydrologiske rande, men dette kan ofte være problematisk bl.a. fordi det kan være svært at identificere naturlige randbetingelser. Problemet kompliceres endvidere af at randbetingelserne kan være tidsvarierende, både på kort sigt, f.eks. sæsonvariationer, og på lang sigt i form af klimatiske variationer. I nogle tilfælde kan der også være tvivl om hvorledes en randbetingelse skal repræsenteres. Er det eksempelvis tilstrækkeligt at anvende et fastholdt potentiale til repræsentation af et vandløb, eller er det nødvendigt med en mere detaljeret beskrivelse. Valget af randbetingelser vil altid have indflydelse på modelresultatet og er derfor en potentiel usikkerhedskilde.

Er der tale om en dynamisk model vil valget af initialbetingelserne introducere endnu en usikkerhedskilde, se kapitel 10. Det vil aldrig være praktisk muligt at specificere "korrekte" startbetingelser for en dynamisk model, og modellen skal derfor bruge en opvarmningstid til at "falde på plads". Usikkerheden pga. initialbetingelser kan reduceres ved anvendelse af lange opvarmningsperioder, men vil sjældent kunne elimineres helt.

Der er flere usikkerhedskilder knyttet til de anvendte modelparametre. For det første er mange af de fysiske parametre ikke direkte målbare, men skal estimeres på baggrund af en analyse af et undersøgelsesresultat, som eksempelvis prøvepumpning. Endvidere spiller skalaforhold en vigtig rolle. Hvor repræsentativ er eksempelvis en prøvepumpning eller en slug-test på gridskala niveau (10^2 m) eller for en zonerig (10^3 m). Dette afhænger i høj grad af den naturlige variabilitet, men selv i det ideelle tilfælde med fuldstændig homogene forhold, er det problematisk at overføre værdier fra felt observationer til modelsystemet, se i øvrigt kapitel 11.

19.4.3 Data

I forbindelse med grundvandsmodellering kan vi lave en grov opdeling af data i to grupper: observationsdata og input data. Observationsdata anvendes i første omgang til opstilling af den konceptuelle model og kan i denne forbindelse være mange forskellige datatyper, såsom "hårde" data i form af topografi, boreprofiler, geofysiske data, geokemiske data og de mere "bløde" datatyper, der f.eks. kan være visuel inspektion eller interviews. Alle datatyperne vil være behæftet med en ob-

servationsfejl. I forbindelse med de hårde datatyper er observationsfejlene ofte relateret til præcisionen med hvilken vi er istand til at måle størrelsen, f.eks. en kemisk analyse eller kote fastsættelse af et målepunkt. I disse tilfælde vil det ofte være muligt at give en god beskrivelse af usikkerheden, og observationerne rapporteres også rutinemæssigt med angivelse af usikkerheden. Mere problematisk forholder det sig mht. de hårde data, hvor det ikke er direkte muligt at estimere en usikkerhed, hvor sikker er f.eks. den geologiske beskrivelse af en borekerne. I disse tilfælde er det, som tilfældet også er for de bløde data, kun muligt at vurdere usikkerheden subjektivt. Under kalibrering og validering af modellen anvendes observationsdata igen til bedømmelse af modellens evne til at genskabe det fysiske system. Indenfor grundvandsmodellering er der som regel tale om potentiale- og afstrømningsdata og i sjældne tilfælde også koncentrationsdata. Usikkerheden på disse data vil i overvejende grad stamme fra observationsfejl, se kapitel 12, dvs. præcision af vores instrumenter og teknik, samt skala problematikken.

Input data f.eks. indvindingsdata og nettonedbør, vil ligeledes være behæftet med usikkerhed. Usikkerheden på indvindingsdata vil i reglen kun være relateret til den præcision hvormed vi kan måle indvindingen, og eksempelvis er istand til at fordele den ud på filterniveau med den sande fordeling mellem de forskellige indtag. I fuldt integrerede modeller er nettonedbørsberegninger integreret i modelsimuleringerne, men ofte er nettonedbøren beregnet vha. et modul, der ikke er koblet til grundvandsmodellen. I begge tilfælde vil der optræde de samme usikkerheder som beskrevet ovenfor mht. input data, dvs. hvor sikre er målingerne af potentiel fordampning og nedbør (herunder bestemmelsen af korrektionsfaktorerne). Anvendes nettonedbør bestemt af en anden model, skal man være opmærksom på at disse resultater ligeledes vil være influeret af alle de ovennævnte usikkerhedskilder på den konceptuelle model, modelopstilling osv.

19.4.4 *Management scenarier*

Modeller anvendes i udbredt grad til scenario kørsler, dvs. til at synliggøre effekten af ændrede forhold, hvadenten disse er menneskeskabte eller naturbetingede. En betydelig usikkerhed i denne forbindelse er netop, hvordan forholdene ændrer sig i fremtiden. Et oplagt problem er, at vi ofte gerne vil give et bud på ressourcens udnyttelse under ændrede klimaforhold, men vi ved reelt ikke hvordan klimaet ændres. Men der også store usikkerheder forbundet med de menneskeskabte forhold. Hvordan vil de politiske forhold ændre sig og ændre vores livsstil? Vil der f.eks. indføres krav om reducerede husdyrhold med en mindre kvælstofbelastning tilføje, eller indføres der nye afgrøder og dermed andre problemstillinger.

Generelt vil usikkerheden på de fremtidige forhold stige i takt med længden af den betragtede tidshorisont. Over meget korte perioder vil ændringen i forholdene være velkendte som f.eks. neddrøsling af indvindingen til halv kapacitet i næste uge. Men ved blot mellemlange tidshorisonter er det vigtigt at overveje betydningen af denne usikkerhed. Dette kan eksempelvis være relevant, når der tages beslutningen om hvor, hvordan, og hvor meget af et magasin der skal beskyttes. Der skal tages stilling til om det er tilstrækkeligt kun at beskytte infiltrationsområdet udpeget på baggrund af de aktuelle forhold, eller om der skal tages hensyn til evt. ændrede forhold.

19.5 HÅNDBOG AF USIKKERHED

I de nedenstående afsnit er der givet nogle bud på hvorledes usikkerheden kan håndteres i forbindelse med en grundvandsmodellering. Afsnittene fokuserer på, hvordan man får lavet en strategi der sikrer, at relevante usikkerhedskilder identificeres, og at betydningen af disse bliver vurderet i projektet. Der vil løbende blive henvist til nogle metoder (markeret ved understregning), der kan anvendes til at belyse betydningen af de enkelte usikkerhedskilder. Disse metoder er kort forklaret i afsnit 19.6.

19.5.1 *Elementer i en usikkerhedsvurdering*

Indenfor den akademiske verden har det længe været erkendt at numeriske modeller er behæftet med usikkerhed. Traditionelt har der været fokus på den del af usikkerheden der skyldes usikkerheden på modelparametrene samt input data, og der er udviklet mange metoder (primært de statisti-

ske metoder) til kvantificering af netop dette bidrag til usikkerheden. Modsat forholder det sig mht. den del af usikkerheden, der stammer fra usikkerheden i den konceptuelle model. Dette område er først rigtigt kommet i fokus indenfor de senere år (Neumann & Wierenga, 2003), skønt det længe har været kendt at netop den konceptuelle model ofte kan være den mest betydende i forbindelse med en usikkerhedsanalyse. På trods heraf er der endnu ikke udviklet nogen formaliseret metode til, hvordan usikkerheden på den konceptuelle model kan håndteres.

Udviklingen i den akademiske verden afspejles i den praktiske anvendelse af grundvandsmodeller. I dag tilbyder de fleste GUIs én eller flere metoder til analyse af usikkerheden på modelparametrene/input data (herefter blot modelparametre), og model usikkerhed bliver ofte sat lig med usikkerheden på modelparametrene. Usikkerhedsvurderingerne bliver således ofte reduceret til en vurdering af parameterusikkerhedens betydning på modelresultatet, en øvelse der udføres i "halen" af den kalibrerede og validerede model. Denne type af usikkerhedsvurderinger fejler alt for ofte mht. en forudgående vurdering af hvilke usikkerhedskilder, der er i den konkrete modelopgave og hvilke usikkerhedskilder der har den største betydning for modelresultatet set i forhold til modelens anvendelsesområde. Ved at sidestille modelusikkerhed med en parameterusikkerhed risikerer man derfor ofte at underestimere den sande model usikkerhed, da der ofte vil være mange usikkerhedskilder, hvoraf nogle kan være mere betydende end parameterusikkerheden.

I den optimale usikkerhedsvurdering er der altså to trin:

1. Identificering, karakterisering og prioritering af usikkerhedskilder.
2. Belysning af betydningen af usikkerhedskilderne (propagering af usikkerheden).

Der findes ingen formaliseret standard metode til identificering og prioritering af usikkerheden, og ofte vil den største udfordring derfor ligge i dette punkt. En nødvendig forudsætning for at få alle usikkerhedsaspekter identificeret er først og fremmest, at usikkerhedsaspektet inddrages løbende gennem hele modelstudiet, således at alle beslutninger ses i et usikkerhedsperspektiv. I de fleste projekter erkendes usikkerheden gennem skriftlige formuleringer som *...kunne tyde på...*, *...sandsynligvis...*, *...formentligt...* etc. En af de store udfordringer ligger i at "fange" disse formuleringer og forsøge at vurdere betydningerne så de kan prioriteres, se næste afsnit. Selve belysningen af betydningen af usikkerheden udføres ofte efter eller i forbindelse med de afsluttende model-simuleringer, hvor modellen benyttes til at propagere usikkerheden, f.eks. i form af en følsomhedsanalyse, anvendelse af multiple model simulering eller en stokastisk metode som Monte Carlo simulering. Selve propagering af usikkerheden til modelresultaterne handler i høj grad om at udvælge en egnet metode som beskrevet i afsnit 19.5.3.

19.5.2 Identificering og prioritering af usikkerhed

I projektforsøget fremkommer der ofte usikkerhedsbetragtninger, f.eks. i forbindelse med databehandling eller tolkning af den geologiske model. Men dette er oftest som relativt vage formuleringer omkring usikkerheden og har kun mindre fokus i et længere skriftligt materiale, såsom rapporter og notater. Der er derfor stor risiko for at disse usikkerhedsbetragtninger glemmes og deres betydning følgelig ikke forsøges kvantificeret. Der er således behov for en metode til at ekstrahere usikkerhedsbetragtningerne og gøre dem synlige på en måde der giver overblik og kan lede til en prioritering samt forslag til håndtering. En velegnet metode hertil kan være anvendelsen af en usikkerhedsmatrix, hvor de identificerede usikkerhedskilder listes og prioriteres. Et simpelt tilfælde herpå er givet i tabel 19.1, med forklarende tekst i tabel 19.2.

Tabel 19.1 Eksempel på en usikkerhedsmatrice

Kilde		Usik.grad/ dækning	Vægt	Effekt	Redu- cerbar	Kvantifi- cerbar	Tiltag	Bemærkninger
D A T A	Potentiale	<i>lille</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>				
	Afstrømning	<i>middel</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>				
	Geologi	<i>stor</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>				
M O D E L	input data							
	Grundvandsdannelse	<i>middel</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>				
	Konceptuel model							
	Geologi	<i>stor</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>				
	Processer	<i>middel</i>	<i>stor</i>	<i>middel</i>				
MANAG EMENT SCENA RIER	Rand	<i>middel</i>	<i>lille</i>	<i>lille</i>				
	Kode	<i>lille</i>	<i>lille</i>	<i>lille</i>				
	Politiske forhold	<i>middel</i>	<i>lille</i>	<i>lille</i>				
	Fremtidige forhold							
	Indvindingsbehov	<i>middel</i>	<i>stor</i>	<i>stor</i>				
SCENARIER	Klima	<i>stor</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>				
	Forureningsbelastning	<i>middel</i>	<i>middel</i>	<i>middel</i>				

Når en usikkerhedskilde er identificeret og indtastet i usikkerhedsmatricen gives en vurdering af betydningen og vægten af denne og hermed effekten. Denne vurdering kan enten foregå ved verbal differentiering såsom, *stor*, *middel* og *lille* eller ved tildeling af en numerisk værdi, hvor værdierne f.eks. kan fastsættes som angivet i tabel 19.3. Scoren for første kolonne af tabel 19.3 er delt op i usikkerhedsgrad og dækning, da betydningen af disse to er forskellige. Under vægt kan der evt. tages hensyn til både betydningen af usikkerheden på modelresultatet og vigtigheden af at være korrekt. Med sidstnævnte menes en vurdering af betydningen af den beslutning der træffes (bl.a. på baggrund af modelresultatet). Vil en forkert beslutning f.eks. føre til en fatal situation, der ikke kan udbedres eller er ekstremt bekosteligt at udbedre, eller er det mindre kritisk. Med "modelresultatet" menes der det modelresultat som modellen primært er sat op for at besvare.

Tabel 19.2 Beskrivelse af kolonner i usikkerhedsmatricen (tabel 19.1)

Kilde	Her angives kilden til usikkerhed
Usik.grad/ dækning	Usik.grad er graden af usikkerhed knyttet til usikkerhedskilden, dvs. er der stor eller lille usikkerhed omkring variabelen. Dækning er primært relevant at vurdere i forhold til tilgængeligheden af data, hvor kvalitet og kvantitet (dækning) af data er betydende for hvor godt modelresultat, der kan forventes.
Vægt	Er hvor betydende faktoren er for modelresultatet
Effekt	Er usikkerhedsgrad x vægt, altså en risikovurdering
Reducerbar	Henfører til om det er muligt at reducere usikkerheden, f.eks. gennem litteratur studier eller supplerende undersøgelser.
Kvantificerbar	Referere til om det er muligt at anvende en metode til at kvantificere usikkerheden, herunder om der er tilstrækkelig information omkring variabelen (f.eks. observationer) til at metoden kan anvendes.
Tiltag	Her vurderes om der skal foretages yderligere tiltag i forbindelse med usikkerhedskilden og i givet fald hvilke. Dette indebærer eksempelvis forslag om ekstra undersøgelser, metode til kvantificering af usikkerhed eller om det kun er muligt at give en kvalitativ beskrivelse af usikkerheden.
Bemærkninger	Her kan angives korte bemærkninger/kommentarer der giver en præcisering af usikkerhedskilden. Specielt nyttig hvis usikkerhedsmatricen anvendes som en dialog platform. Her kan evt. også referes til en rapport hvor usikkerheden er beskrevet mere detaljeret.

Tabel 19.3 Eksempel på numerisk evaluering af usikkerhed og vægt

Score	1	2	3	4	5
Usikkerhedsgrad	Variablen er for praktiske forhold sikkert bestemt, dvs. ingen usikkerhed	Variablen er godt bestemt men erkendt usikker	Moderat usikkerhed (variationskoefficient 1)	Stor usikkerhed. (variationskoefficient >> 1)	Størrelsen af variabelen er total ukendt
Dækning	Ekstra data i rum/tid vil ikke tilføre ny information	En god dækning, men enkelte huller i rum/tid	Åbenlyse huller i datasæt for fokusområdet, men tilstrækkelig til opnåelse af meningsfuldt resultat	Åbenlyse huller i kritiske områder. Modeljob vil være tydeligt påvirket	Data dækning er utilstrækkelig for det ønskede modeljob
Vægt	Usikkerheden har ikke betydning for modelresultatet	Usikkerheden har mindre betydning for modelresultatet.	Usikkerheden har mindre betydning for modelresultatet. Vigtigheden af at være korrekt er stor.	Usikkerheden har direkte betydning for modelresultatet	Usikkerheden har direkte betydning for modelresultatet. Vigtigheden af at være korrekt er stor.

Når usikkerhedskilder med høj prioritet (stor effekt) er identificeret, skal der tages stilling til om det er muligt at reducere usikkerheden på variabelen, f.eks. gennem nye undersøgelser. Ligeledes vurderes, om det er muligt at kvantificere usikkerheden, f.eks. ved anvendelse af en af metoderne i afsnit 19.6. I sidste kolonne gives endeligt et forslag til håndtering af usikkerheden. Ved udfyldelse af usikkerhedsmatricen skal der tages hensyn til, hvad formålet og det ønskede præcisionskrav er for modellen. F.eks. vil der ikke være samme krav til data kvalitet/kvantitet for en model til overslagsberegninger af grundvandsressourcen som for en detaljeret stoftransportmodel.

En usikkerhedsmatrix kan anvendes interaktivt under projektførelsen, således at matricen tilføjes nye usikkerhedskilder, i takt med at disse identificeres. I starten vil det ofte kun være muligt med en overordnet vurdering af usikkerheden, men med fremdriften af projektet vil det være muligt at udvide usikkerhedsmatricen ved tilføjelse af nye usikkerhedskilder, og/eller ved en detaljering af de allerede listede usikkerhedskilder, samt en mere nuanceret score, f.eks. som i tabel 19.3.

Gennemføres der reviews i forbindelse med modelopgaven kan usikkerhedsmatricen anvendes som en platform for diskussion omkring usikkerheden. Under det udførte arbejde op til et review møde indsættes relevante usikkerhedskilder i matricen. Ved et review møde, gennemgås de enkelte kilder og usikkerhedsgrad og vægt diskuteres. For kilder med stor betydning opnås der enighed omkring tiltag, hvilket afhænger af om usikkerheden kan reduceres og i givet fald hvordan og om det er økonomisk rentabelt, eller om det er muligt at give en god karakterisering af usikkerheden og det besluttet først at lave en statistisk usikkerhedsanalyse, før der tages stilling til om der skal indhentes flere data. Det kan også være at usikkerheden hverken kan reduceres eller kvantificeres, hvorfor der kun kan gives en ekspert vurdering, der dokumenteres verbalt i den endelige modelrapport. Endelig vil der være tilfælde, hvor det besluttet ikke at beskæftige sig mere med en usikkerhedskilde, enten fordi den vurderes ubetydelig eller fordi det ikke er muligt at give en meningsfuld vurdering af usikkerhedens størrelse eller effekten heraf. Disse tilfælde skal ligeledes dokumenteres, så det er gennemskueligt for såvel de involverede parter som tredje part, hvilke usikkerhedskilder der er overvejet, hvilke der er inddraget i en usikkerhedsvurdering og hvilke usikkerhedskilder der bevidst er udeladt fra vurderingen.

19.5.3 Kvantificering af usikkerhed

Med fokus på usikkerhedsaspektet gennem hele projektførelsen vil man erkende, at der optræder mange usikkerhedskilder og af meget varierende karakter. På grund af deres forskellighed vil det ikke være muligt at kvantificere samtlige usikkerheder med én og samme metode, og der er derfor behov for en suite af forskellige metoder, hvorfra der kan vælges en egnet metode. Hvilken metode

der er egnet afhænger af vores kendskab til usikkerheden, eller vores tillid til vores viden om usikkerheden. I tabel 19.4 er der givet et bud på hvilke typer af usikkerhedsvurdering der kan anvendes i forbindelse med typiske usikkerhedskilder, når usikkerheden karakteriseres som beskrevet i afsnit 19.2. I de tilfælde hvor det er muligt med en fuldstændig statistisk karakterisering af usikkerheden (*Statistisk usikkerhed*) er det muligt at anvende de statistiske/stokastiske metoder, såsom Fejlophobning (FO) for simple relationer, FølsomhedsAnalyse (FA) eller den mere detaljerede Monte Carlo Simuleringer (MC). Er der tale om opbygningen af den geologiske model vil det endvidere være muligt at anvende T-PROGS når der kan gives en statistisk karakterisering af usikkerheden. I nogle tilfælde kan statistikken ikke udledes direkte fra empiriske data, hvorfor det er nødvendigt at give en Ekspert Vurdering (EV) af eksempelvis udfaldsrummet eller en fordelingsfunktion. Ved *Scenario usikkerhed* er udfaldsrummet kendt, eller kan vurderes med rimelig sikkerhed, hvorimod sandsynlighederne er ukendte. Her er det altså ikke muligt at anvende de statistiske metoder (FO og MC). Er der tale om den konceptuelle model vil der kunne opstilles forskellige alternative modeller Multiple Model Simulering (MMS). Det vil også være muligt at anvende GLUE metoden, skønt dette ikke er set til dato. I forbindelse med parameterusikkerhed vil det være muligt at anvende de InverseRutiner (IR) når vi blot kan afgrænse parameterintervallet (herefter beregner metoderne selv den nødvendige statistik). Ved *Erkendt uvidenhed* er det ikke muligt at give en absolut kvantificering af usikkerheden og dermed heller ikke betydningen af usikkerheden. I disse tilfælde kan usikkerheden kun formidles verbalt ved en kvalitativ vurdering baseret på en Ekspert Vurdering.

Tabel 19.4 Oversigt over metoder der kan anvendes til vurdering af usikkerhedens betydning afhængig af niveau for usikkerheden.

Usikkerhedskilde	Karakterisering af usikkerhed			
	Statistisk usikkerhed	Scenario usikkerhed	Erkendt uvidenhed	
Data	System data	FO, EV, MC, FA	EV, FO	EV
	Drivende variable	FO, EV, MC, FA	EV, FO	EV
Model	Konceptuel model	EV, FA, MC, T-PROGS	EV, MMS, GLUE	EV
	Parametre	EV, MC, FA	EV, FO, GLUE, IR	EV
Management scenarier		EV, MC, FA	EV, FO, MMS	EV

- FO : Fejlophobning (afsnit 19.6.1)
- MC : Monte Carlo simuleringer (afsnit 19.6.2)
- GLUE : Generalized Likelihood Uncertainty Estimation (afsnit 19.6.3)
- IR : Inverse Rutiner (afsnit 19.6.4, 19.6.5 og kapitel 14)
- T-PROGS : Transition Probabilities (afsnit 19.6.6)
- FA : Følsomheds Analyse (afsnit 19.6.7)
- MMS : Multiple Model Simulering (afsnit 19.6.8)
- EV : Ekspert Vurdering (afsnit 19.6.9)

19.5.4 Usikkerhedsstrategi

Usikkerhed vil typisk få en særlig behandling specielle steder i et projekt. Første gang er i *projektstarten* hvor formålet, nøjagtighedskravene og hele modelleringsstrategien fastlægges. Her er det specielt vigtigt at fokusere på anvendelsen af modellen, er fokus f.eks. ressource opgørelse, overflade-/grundvandsinteraktion, stoftransport, samt hvilke nøjagtighedskriterier der skal stilles til modellen. Hvilke processer modellen skal simulere vil være bestemmende for hvilke usikkerhedskilder, der vil influere på modelresultaterne og i hvilken grad. Samtidig vil de opstillede nøjagtighedskrav diktere, hvor store ressourcer der skal allokeres i et forsøg på om muligt at reducere usikkerheden og kvantificere den ikke reducerbare usikkerhed. I denne fase er det derfor vigtigt at

nøjagtighedskriterierne overvejes seriøst, da der skal være overensstemmelse mellem de opstillede nøjagtighedskriterier, og de ressourcer der er villighed til at allokere. I denne indledende fase er det ligeledes vigtigt, at de forskellige aktører (vandressourceforvalter, modellør og interessenter) mødes og bliver enige om hvilke usikkerhedskilder, der er involveret, og hvilke der har størst betydning. Dette er ikke en decideret teknisk vurdering i forbindelse med modelanvendelsen, men er en vigtig øvelse i hele beslutningsprocessen, i tilfælde hvor interessenter kan blive direkte berørt af de beslutninger der måtte blive truffet enten helt eller delvist på baggrund af modelsimuleringerne. Ved projektstart drejer det sig således om at få et overblik over hvilke usikkerhedskilder, der kan tænkes at optræde under modelleringsarbejdet, og få disse prioriteret, så der i modelleringen fokuseres på de områder, hvor der er enighed om, at modelstudiet bedst muligt kan hjælpe til at reducere usikkerheder af betydning for beslutningsprocessen. Endelig gælder det om at få denne prioriterede liste "ført til protokol". Anvendes usikkerhedsmatricen vil det i dette indledende step oftest kun være mulig med en overordnet udfyldelse, som eksemplet i tabel 19.1.

I forbindelse med opstillingen af den *konceptuelle model* vil der typisk være flere usikkerhedsaspekter, ikke mindst tolkningen af den hydrogeologiske model. Alt efter områdets geologiske dannelseshistorie vil der være forskellige usikkerhedsaspekter, såsom meget kompleks geologi i randmoræne områder eller dybe begravede dale. Afhængig af den aktuelle model udvides usikkerhedsmatricen med de relevante punkter, et eksempel herpå er givet i tabel 19.5. Under opstillingen af den *sted-specifikke model* vil der ofte optræde usikkerheder i forbindelse med eksempelvis repræsentation af processer og valg af randbetingelser.

Når usikkerhedskilderne er identificeret vil det være muligt at give disse ekstra opmærksomhed i forbindelse med *kalibreringen og valideringen* af modellen. Dvs., med de identificerede usikkerheder in mente kan der designes nogle ekstra model simuleringer til at vurdere anvendeligheden og troværdigheden af den opstillede model til specifikke typer anvendelser. Det er et skridt oveni de analyser modellen udsættes for i valideringstestene.

Det sidste led i usikkerhedsvurderingen foretages i forbindelse med de afsluttende *modelsimuleringer*. Usikkerhedsanalysen udføres for de usikkerhedskilder, der er identificeret som de potentielt mest betydende. Den egnede metodik udvælges som beskrevet i afsnit 19.5.3. Mest sandsynligt vil det være, at der på dette tidspunkt er identificeret flere usikkerhedskilder, og det vil næppe være muligt at kvantificere alle usikkerhedsbidrag vha. en enkelt metode. Propageringen af usikkerhederne til modelresultatet vil derfor ofte betyde anvendelse af flere metoder, enten anvendt parallelt eller i kombination.

Table 19.5 Eksempel på en detaljeret usikkerhedsmatrice i forbindelse med opstilling af en grundvandsmodel.

Kilde			Usik.grad/ dækning	Vægt	Effekt	Reduc. b.
	*					
	*					
M O D E L	input data					
		Grundvands- dannelse	Størrelse			
			distribueret			
			tidslig opløsning			
		Indvindinger	størrelse			
			tidslig opløsning			
		Hydrogeologi				
		UZ	Homogenitet			
			Kontinuitet			
		Lag2 ML	Homogenitet			
			Kontinuitet			
		Lag3 sand	Homogenitet			
		*	*			
		*	*			
		Danien	Sprækker			
			Forkastninger			
			Erosionsdal			
			Homogenitet			
			Kontinuitet			
		Processbeskrivelse				
		Geokemi				
			Nitrat reduktion			
			*			
		*				
		Parametre				
		Parameterisering (zoning)				
		Parameter værdier	Hydr. ledevne			
	vandl. lækage					
	Magasintal					
	Geokemisk					
	Rand					
	Ydre rand(e)					
		*				

19.6 METODER TIL VURDERING AF USIKKERHEDENS BETYDNING

Som beskrevet ovenfor eksisterer der mange forskellige usikkerhedskilder af meget varierende karakter, og til trods for at nogle usikkerhedsbidrag vil kunne reduceres vil det aldrig være muligt at eliminere dem alle. Til vurdering af usikkerhedernes betydning for modelresultaterne er det derfor nødvendigt, at have forskellige metoder til rådighed, hvorfra den optimale metode kan vælges afhængig af hvor usikkerheden optræder, hvilken kendskab der er til usikkerheden samt årsagen til usikkerheden, dvs. usikkerhedens lokalitet, niveau og natur jf. afsnit 19.2. I de efterfølgende afsnit gives en kort præsentation af grundidéen bag udvalgte metoder til usikkerhedsvurdering. For en mere detaljeret gennemgang af metoderne henvises der til litteraturen. Til nærværende kapitel er der hentet generel inspiration i to dokumenter *RIVM/MNP Guidance for Uncertainty Assessment and Communication: Tool Catalogue for Uncertainty Assessment* (Sluijs et al., 2004) og *Harmoni-CA Guidance, Uncertainty Analysis* (Refsgaard et al., 2004).

19.6.1 Fejlophobning

Fejlophobningsloven anvendes til en statistisk kvantificering af usikkerheden ved simple relationer. Hvis usikkerheden på en given størrelse skyldes usikkerhedsbidrag fra flere led kan den samlede usikkerhed beregnes efter fejlophobningsloven. Metoden anvendes oftest i forbindelse med estimering af den del af usikkerheden der er relateret til input data.

Udførelse: Regler for typiske regneoperationer er givet i boks 1. I kapitel 12 er additionsreglen eksempelvis anvendt til at estimere den totale usikkerhed på pejleobservationerne.

Addition og subtraktion: $z = x + y + \dots$ eller $z = x - y - \dots$

$$\sigma_z = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \dots}$$

Multiplikation med en konstant: $z = cx$

$$\sigma_z = c\sigma_x$$

Multiplikation eller division: $z = xy$ eller $z = x/y$

$$\frac{\sigma_z}{z} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2 + \dots}$$

Boks 1 Regler for fejlophobning for typisk anvendte regneoperationer

Fordele:

- Nem at forstå og simpel at udføre (kan udføres på en almindelig lommeregner eller i standard regneark)

Ulemper:

- Kan kun udføres for meget simple relationer
- Begrænset gyldighed.
 - Usikkerheden skal være relativt lille, dvs. variationskoefficienten (standard afvigelsen divideret med middelværdien) skal være mindre end ca. 0.3.
 - De enkelte usikkerhedsbidrag skal følge en normal fordeling

19.6.2 Monte Carlo

Monte Carlo simuleringer er en statistisk numerisk metode, der har til formål at kvantificere usikkerheden på modelresultaterne som funktion af usikkerheden på input og/eller parameterværdier. Metoden tilhører gruppen af stokastiske metode, hvor Monte Carlo metoden er den mest udbredte specielt i forbindelse med rådgivningsopgaver. Grundidéen i de stokastiske metoder er at de indgående størrelser (stokastiske parametre) ikke præsenteres som en eksakt værdi, men derimod et interval, angivet ved en middelværdi og en spredning om denne, samt en sandsynlighedsfordeling indenfor intervallet (f.eks. normal eller lognormal fordeling). Monte Carlo simuleringer udføres ved, at der for hver af de stokastiske parametre "trækkes" (på engelsk: *samples*) en værdi, der ligger indenfor det definerede interval for denne parameter. Herefter foretages en almindelig modelkørsel, og der trækkes en ny parameterværdi for de stokastiske parametre efterfulgt af endnu en modelkørsel. Dette gentages "mange" gange, på en måde der tilgodeser sandsynlighedsfordelingen for de enkelte stokastiske parametre, dvs. der trækkes flest værdier i den del af intervallet hvor parameterværdien har en stor sandsynlighed. Hver modelkørsel kaldes en "realisation" og samtlige realisationer benævnes et "ensemble". Ved en efterfølgende statistisk analyse af samtlige realisationer kan der f.eks. beregnes middel samt standard afvigelse for ensemblet. Modelresultaterne kan således præsenteres som en middelværdi samt et sandsynligheds interval.

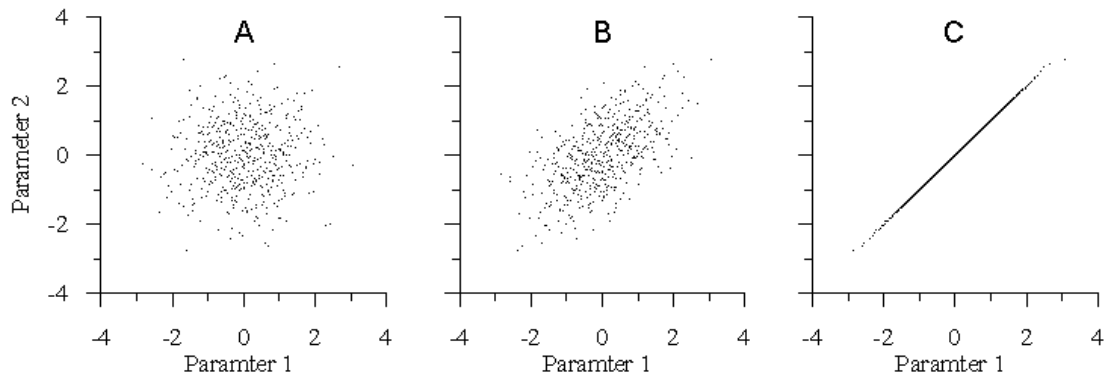
Standard Monte Carlo simuleringer understøttes af mange af de kommercielle GUIs, der er på markedet i dag, hvorved filopsætning, udførelse af de stokastiske simuleringer samt den efterfølgende databehandling bliver en overkommelig opgave. For en standard Monte Carlo simulering ligger den største ressourcemæssige post således i CPU-tid, dvs. den tid der er nødvendig for at eksekvere de mange modelkørsler. I tilfælde hvor den anvendte GUI ikke understøtter Monte Carlo simuleringer eller hvis der er behov for ikke-standard simuleringer kan der downloades nogle kommercielle software packages f.eks. <http://www.palisade.com> og http://www.decisioneering.com/crystal_ball der begge er integrerede microsoft excel add ins og kan anvendes til sampling uden det store forhåndskendskab til teorien. Der findes også tilgængelige freeware som SIMLAB <http://www.jrc.cec.eu.int/uasa/prj-sa-soft.asp> (programmet bliver muligvis gjort kommerciel på et tidspunkt, p.t. kræver det blot at man rekvirere en gratis licens kode).

Udførelse: Monte Carlo simuleringer består af flere af følgende delopgaver

- Identificering af parametre der skal indgå i Monte Carlo analysen (stokastiske parametre)
- Statistisk karakterisering af de stokastiske parametre
- Trækning (sampling) af gyldige parameterkombinationer
- Modelkørsler
- Statistisk efterbehandling af modelkørslerne

Nedenstående diskuteres nogle af de punkter, der specielt kræver opmærksomhed i forbindelse med afvikling og analyse af Monte Carlo simuleringer.

Udvælgelse af parametre I forbindelse med kalibrering er det anbefalet at starte med en udvælgelse af hvilke parametre, der skal indgå i kalibreringen. Samme strategi kan evt. vælges i forbindelse med en Monte Carlo simulering så kun følsomme parametre medtages som stokastiske. Dette er der dog potentielt en stor risiko ved. At en parameter ikke er følsom i forbindelse med en optimering betyder jo blot at parameteren ikke ændrer modelresultatet væsentligt for de typer af observationer vi har til rådighed for vores kalibrering, samt deres tidlige og/eller rumlige placeringen. En lille følsomhed kan derfor eksempelvis skyldes, at en K-værdi repræsenterer en zone med ingen eller kun meget få observationer. Påvirker zonen endvidere ikke de øvrige K-zoner vil denne K-værdi have lille følsomhed i kalibreringen. K-værdien har altså lille betydning på resultatet i forhold til de tilgængelige observationer, men kan godt have stor betydning for modelresultatet. Dette taler altså for at medtage alle parametre, der forventes at have en effekt på modelresultatet. Under udvælgelse af de stokastiske parametre skal der tillige tages hensyn til en evt. parameterkorrelation. Korrelationen betyder, at der er en indbyrdes afhængighed mellem parametrene, hvorfor disse ikke kan trækkes uafhængigt. Parameterkorrelationer kan teoretisk estimeres på baggrund af felldata, men dette kræver et stort datamateriale for at få meningsfulde værdier, hvorfor det i praksis kun sjældent er en farbar vej. Er der anvendt invers optimering til kalibrering vil den endelige kalibreringsstatistik fra den inverse rutine som regel også indeholde en korrelationsmatrice, der angiver parametrene indbyrdes korrelation, se kapitel 14. Betydningen af parameterkorrelation er illustreret på figur 19.3a-c for to parametre der er samlet fra en normalfordeling med henholdsvis: ingen korrelation (19.3a) positiv korrelation på 0.5 (19.3b) og en perfekt korrelation, dvs. en korrelation på 1.0 (19.3c). Som det fremkommer af figuren kan der samples frit fra hele parameterrummet i tilfælde af ukorrelerede parametre, selvfølgelig med en større hyppighed hvor parametrene sandsynligheder er størst. I tilfælde af korrelerede parametre kan der derimod ikke trækkes fra hele parameterrummet. Hvis der i tilfælde af perfekt korrelation (figur 19.3.c) f.eks. trækkes en værdi på 1.0 for parameter 1, vil værdien af parameter 2 automatisk være fastlagt til også at antage værdien 1.0. Med en korrelation på 0.5 vil der være lagt mindre bånd på parameter 2, som i tilfældet med parameter 1 lig 1.0 vil parameter 2 approksimativt kunne variere indenfor intervallet [-1; 2]. Har man udvalgt en stokastisk parameter til Monte Carlo simuleringerne, der er korreleret med én eller flere af de øvrige modelparameter, er det således principielt nødvendigt også at medtage disse parametre og specificere deres indbyrdes korrelation.



Figur 19.3 Betydning af parameterkorrelation. Sampling af to normalfordelte parametre uden indbyrdes korrelation (A) og korrelationer på 0.5 (B) og 1.0 (C)

Statistisk karakterisering. For samtlige stokastiske parametre skal der specificeres en sandsynlighedsfunktion, hvilket ikke er nogen trivial opgave. Den mest intuitive metode er ved analyse af feltdata. Har man tilstrækkeligt med feltdata (f.eks. K-data fra slugtests) kan disse analyseres og en sandsynlighedsfunktion med tilhørende middelværdi og spredning kan opstilles. Dette kræver imidlertid et stort datamateriale, hvilket kun sjældent er til rådighed. Selv ved tilstrækkeligt med data vil der være problemer med metoden i form af skaleringsproblemer. Er den estimerede K-værdi eksempelvis repræsentativ for den anvendte skala i modellen (gridskala/zonering)? Er det ikke muligt at anskaffe tilstrækkeligt med data kan "ekspert vurdering" være et alternativ, altså en subjektiv vurdering fra folk med stor erfaring. Oplagte ulemper i denne forbindelse er, at denne vurdering netop er subjektiv og derfor reflekterer den enkelte "eksperts" vurdering af en given størrelse. Nogle vil eksempelvis have stor tiltro til en metode og dennes repræsentativitet (f.eks. slug tests) og derfor tildele de estimerede værdier en lille usikkerhed, omvendt vil andre have lille tiltro og følgelig tildele en stor usikkerhed til estimererne. Hvis der er anvendt invers optimering kan et tredje alternativ være at anvende de konfidensintervaller, der beregnes som del af den endelige kalibreringsstatistik i stort set alle inverse optimeringsrutiner. Af væsentlige fordele ved denne metode skal fremhæves, at parametrenes konfidensintervaller her er beregnet på basis af den specifikke model setup, se afsnit 14.5 om parameterusikkerhed. Dvs. konfidensintervallerne er et udtryk for usikkerheden på de effektive modelparametre givet den anvendte modelstruktur og de tilgængelige observationsdata. Da konfidensintervallerne beregnes for de effektive parametre er der altså ikke noget skaleringsproblem og da det er beregnede størrelser er estimererne objektive. Der er imidlertid nogle antagelser, der skal være overholdt for at de estimerede konfidensintervaller er korrekte. Dette er antagelser omkring residualerne, der ideelt set skal være uafhængige og normalfordelte, og ofte en antagelse om linearitet. Hvis disse antagelser ikke er overholdt vil de estimerede konfidensintervaller kun tilnærmelsesvis være korrekte. En anden fordel ved at anvende resultaterne fra den inverse optimering er, at disse værdier allerede foreligger efter endt kalibrering og altså ikke kræve ekstra arbejdsindsats. Er modellen ikke kalibreret inverst, men den anvendte GUI indeholder en rutine for invers optimering, er det som regel en relativt begrænset arbejdsindsats, der skal gøres for at anvende den inverse rutine til at beregne en kalibreringsstatistik, og kræver ikke en egentlig optimering.

Det fremgår således, at det ikke er en trivial opgave at skulle bestemme de statistiske størrelser for en stokastisk parameter, og at det kun sjældent kan lade sig gøre at bestemme disse eksakt. For langt de fleste tilfælde vil det kun være muligt at estimere parameterusikkerhederne ved anvendelse af en invers rutine, men selv her vil der være tale om tilnærmelser. Foruden en middelværdi samt spredning er det nødvendigt at specificere en fordelingsfunktion for de stokastiske parametre. Typiske stokastiske parametre er den hydrauliske ledningsevne og/eller grundvandsdannelsen til det mættede magasin, og for disse to parametertyper antages det som regel at den hydrauliske ledningsevne følger en log-normal fordeling hvorimod grundvandsdannelsen følger en normalfor-

deling. En normalfordeling $N(\alpha, \beta^2)$ siges at have fordelingsparametrene α og β^2 og tæthedsfunktionen er givet ved

$$f(x) = \frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left[\frac{x-\alpha}{\beta}\right]^2\right] \quad (19.1)$$

For en normalfordeling er fordelingsparametrene lig med middelværdien (μ) og variansen (σ) der er den kvadrede standard afvigelse. Tæthedsfunktionen for en lognormal fordeling er givet ved

$$f(x) = \frac{1}{x\beta\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left[\frac{\ln(x)-\alpha}{\beta}\right]^2\right], \quad x > 0 \quad (19.2)$$

En lognormalfordeling $LN(\alpha, \beta^2)$ har ligeledes fordelingsparametrene α og β^2 men relationen mellem fordelingsparametrene og middelværdi samt variansen er i dette tilfælde givet ved

$$\mu = \exp\left[\alpha + \frac{1}{2}\beta^2\right] \quad (19.3)$$

$$\sigma^2 = \exp\left[2\alpha + \beta^2\right] (\exp[\beta^2] - 1) \quad (19.4)$$

Fordelingsparametrene kan følgelig udtrykkes på baggrund af middel og standard afvigelse ved

$$\alpha = \ln[\mu] - \frac{1}{2} \ln\left[\frac{\sigma^2}{\mu^2} + 1\right] \quad (19.5)$$

$$\beta^2 = \ln\left[\frac{\sigma^2}{\mu^2} + 1\right] \quad (19.6)$$

Anvendes data fra en invers optimering kan standardafvigelsen beregnes på baggrund af de opgivende 95% konfidens intervaller.

$$stdev(normal \text{ fordeling}) = \frac{U95 - L95}{2 * 1.96} \quad (19.7)$$

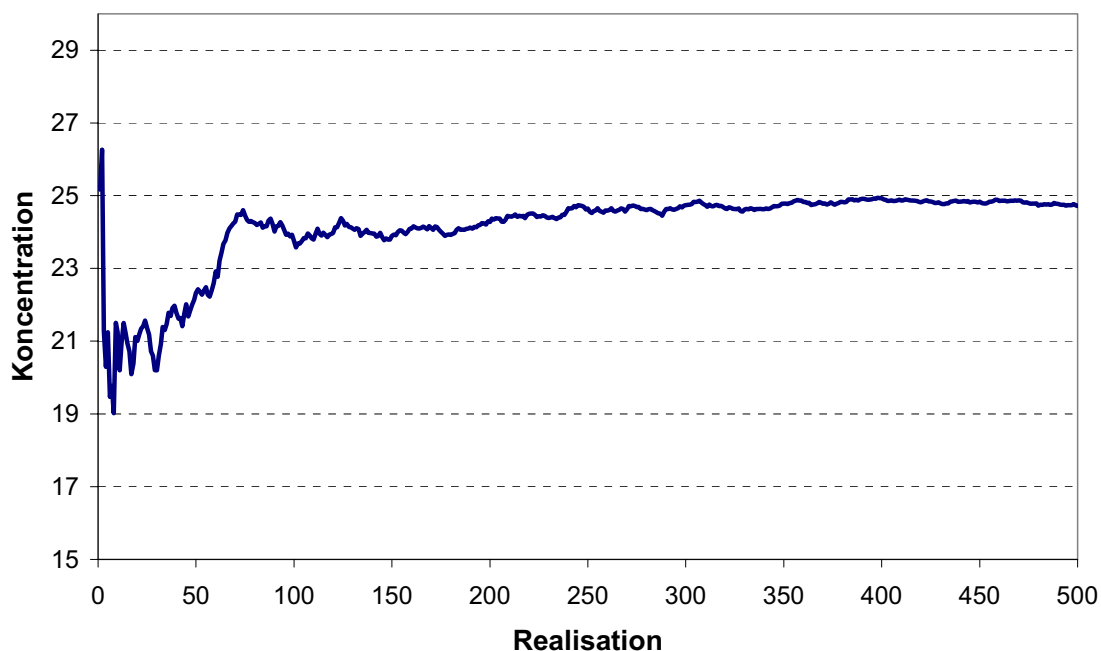
$$stdev(lognormal \text{ fordeling}) = \sqrt{\left(\exp\left[\frac{\ln U95 - \ln L95}{2 * 1.96}\right]^2 - 1\right) mean^2} \quad (19.8)$$

Ved indtastning af de stokastiske parametre i en GUI skal man være omhyggelig mht. hvorledes data skal indtastes, da der er forskel på om middel samt spredning skal angives som "normale" værdier eller logtransformerede værdier. Endvidere skal man være opmærksom på om det er middelværdi og standard afvigelse der skal indtastes eller om det er sandsynlighedsfunktionens fordelingsparametre.

Sampling En hyppig metode til udvælgelse af parameterverdierne er ved tilfældig trækning ("random draw"), dvs. parameterverdierne trækkes tilfældigt indenfor deres respektive intervaller (men tilgodeser fordelingsfunktionen og eventuelle korrelationer mellem parametrene). Da parameterverdiernes sandsynlighed aftager mod interval endepunkterne, skal der derfor trækkes mange gange for at få endepunkterne repræsenteret. Antallet af nødvendige trækninger øges endvidere når der indgår flere parametre, for at sikre at parametrenes fælles fordelingsfunktion (joint probability density function, jpdf) beskrives i tilstrækkelig detalje. Der kan reduceres betydeligt i antallet af nødvendige realisationer ved anvendelse af en mere sofistikeret trækning af parameterverdierne, der benævnes Latin Hypercube sampling, se Helton and Davis (2003) for en detaljeret teknisk gennemgang. Denne metode tilhører en gruppe af stratificerede sampling metoder, og går ud på at opdele udfaldsrummet i intervaller med lige stor sandsynlighed, hvorefter der trækkes lige mange

gange indenfor hvert interval. På denne vis sikres det at der trækkes i hele intervallet (inklusive yderpunkterne) samtidig med at sandsynlighedsfordelingen tilgodeses.

Men selvom der anvendes Latin Hypercube sampling, er det nødvendigt at generere et stort antal af realisationer, for at hele parameterområdet (dvs. mulige udfald af parametre og parameter kombinationer) bliver afprøvet. Der kan ikke gives nogen gylden regel for præcist hvor mange realisationer, der er nødvendig. Dette afhænger som tidligere nævnt af antallet af stokastiske parametre, der indgår i analysen, hvor betydende disse parametre er for modelresultatet (parameter følsomhed), og hvor godt sandsynligheden på modelresultaterne ønskes beskrevet. I nogle referencer angives det for Latin Hypercube at antallet af realisationer skal være mindst $3/2$ gange antallet af parametre, men at det typisk er nødvendigt med et langt større antal f.eks. 10 gange antallet af parametre. I forbindelse med grundvandsmodeller vil selv 10 gange antallet af parametre dog ofte være helt utilstrækkelig. Hvorvidt der har været anvendt tilstrækkeligt mange realisationer kan testes efter den udførte Monte Carlo simulering, ved at teste konvergens af de statistiske størrelser for ensemblet (dvs. alle realisationerne) mht. et givent model output. Er man eksempelvis interesseret i koncentrationsniveauet i en boring kan ensemble middelværdien af denne koncentration udregnes successivt, dvs. efter første realisation er middelværdien lig den simulerede værdi, efter anden realisation er middelværdien middel af de to første realisationer og så fremdeles. I starten vil middelværdien variere kraftigt, da hver ny værdi vil have stor vægt ved udregning af middelværdien, men efter tilstrækkeligt mange realisationer vil middelværdien kun ændres minimal ved addering af endnu en værdi, se figur 19.3 for eksempel. Når middelværdien ikke ændres væsentligt ved addering af nye værdier siges det, at ensemblet har nået konvergens mht. middelværdien.



Figur 19.4 Udvikling af ensemble middelværdi for simuleret koncentration.

At det nødvendige antal modelkørsler generelt er proportionalt med antallet af stokastiske parametre, taler for en udvælgelse af hvilke parametre, der skal indgå i analysen, og altså ikke som anbefalet tidligere, at inkludere næsten samtlige parametre. Men hvis en parameter ikke influerer på modelresultatet vil det heller ikke have indflydelse på konvergensraten og således ikke kræve flere modelkørsler. Medtages en parameter derfor i Monte Carlo simuleringen, som ikke har betydning for modelresultatet vil det altså ikke øge antallet af nødvendige modelkørsler. Udelades der-

imod en parameter fordi den fejlagtig antages at være uden betydning, vil dette have betydning for usikkerhedsanalysen. Det anbefales derfor, at parametre fravælges med stor forsigtighed.

Nogle GUIs, der tilbyder faciliteter for Monte Carlo simuleringer, giver ikke mulighed for specificering af en eventuel parameterkorrelation. Som det ses af figur 19.3 så betyder en evt. parameterkorrelation, at der ikke kan trækkes fra hele parameterrummet. Tilgodeses korrelationen ikke ved sampling betyder dette, at der vil samples parameterkombinationer, der ikke er gyldige pga. den indbyrdes korrelation, hvilket generelt vil føre til overestimering af usikkerheden. Det er imidlertid meget svært, om end ikke umuligt, at estimere en troværdig parameterkorrelation. Kun i meget specielle tilfælde vil det være muligt at estimere korrelationen på baggrund af observerede data, og det vil derfor være nærliggende at anvende korrelationerne estimeret vha. en invers rutine. Disse estimater er dog relativt usikre pga. ikke-linearitet som beskrevet i Hill & Østerby (2003). Hvorvidt det er acceptabelt med en antagelse om ikke-korrelerede parametre afhænger af hvor følsom modelresultaterne er mht. de evt. korrelerede parametre, og vil således variere fra sag til sag.

Fordele: Der er flere grunde til at Monte Carlo metoden er blevet den hyppigst anvendte metode, disse er bl.a.

- Er intuitiv let at forstå
- Ingen krav til fordelingsfunktionen for de stokastiske parametre. Dvs. det er ikke en forudsætning for metoden, at alle de stokastiske parametre følger en bestemt fordelingsfunktion endside den samme fordelingsfunktion.
- Det er muligt at tage højde for indbyrdes korrelation mellem de stokastiske parametre.
- Kan anvendes for alle variable blot denne kan kvantificeres statistisk. Monte Carlo simulering anvendes hyppigst i forbindelse med analyse af usikkerheden på de hydrauliske parametre eller input data, men kan i princippet omfatte eksempelvis randbetingelser, hvis der kan opnås en statistisk kvantificering af denne.

Ulemper:

- Kræver afvikling af mange modelsimuleringer for at opnå et meningsfuldt resultat. Dette skyldes, at hele udfaldsrummet for de stokastiske parametre skal undersøges (se nedenfor).
- Der skal specificeres en sandsynlighedsfunktion for hver af de stokastiske parametre.

19.6.3 *Generalized Likelihood Uncertainty Estimation methodology, GLUE*

GLUE (Beven og Binley, 1992) minder i nogen grad om Monte Carlo simuleringer, idet usikkerheden på de usikre variable forplantes til modelresultaterne ved afvikling af et stort antal modelkørsler. De to metoder er dog fundamental forskellige i den grundlæggende filosofi. I GLUE afvises antagelsen om, at der findes ét optimalt parametersæt, og det accepteres at der findes flere (ofte mange) forskellige parameterkombinationer, der resulterer i lige gode fit til observationerne (benævnt equifinality problemet). I GLUE går øvelsen derfor ud på at finde de parameterkombinationer, der tilfredsstiller nogle opstillede krav til model performancen. Modsat Monte Carlo metoden er et kendskab til fordelingsfunktionerne ikke en nødvendig forudsætning for anvendelsen af GLUE. Tværtimod defineres fordelingsfunktionerne fra start (prior statistics) ofte som brede uniforme funktioner, der afspejler at vi ofte ikke har kendskab eller kun meget begrænset kendskab til fordelingsfunktionerne. Der er altså ikke på forhånd gjort antagelser om hvilke parameterkombinationer der mest sandsynlige, eller slet ikke sandsynlig. I GLUE vurderes sandsynligheden for en given parameterkombination ved fastsættelse af en eller flere likelihood funktion(er) der udtrykker sandsynligheden for at en given parameterkombination kan være "korrekt". I den mest simple form kan likelihood funktionen f.eks. defineres på baggrund af de beregnede residualer, hvor det fastsættes, at alle parameterkombinationer der giver en summeret kvadratafvigelse sum der er mindre end et givent niveau accepteres som mulige parameterkombinationer ("behavioral models"), og øvrige kombinationer forkastes. Usikkerheden på parametrene kan efterfølgende estimeres på baggrund af de accepterede parameterkombinationer.

Udførelse: GLUE metoden er kun understøttet af ganske få GUIs, men der kan downloades et program til analyse af modelkørsler efter GLUE princippet på <http://www.es.lancs.ac.uk/hfdg/glue.html>, hvor der også kan findes lidt ekstra information.

Fordele: Et tiltalende element i GLUE er, at det accepteres at der kan være mange parameterkombinationer, der kan føre til lige gode fit i data, hvorfor der ikke eksisterer én optimal parameterkombination. I praksis har det den fordel at metoden ikke kræver kendskab til en fordelingsfunktion for parameteren, hvilket, som beskrevet under Monte Carlo metoden, kan være meget svært.

Ulemper: En af de væsentligste ulemper ved metoden er at det kræve mange modelkørsler, mange flere end den traditionelle Monte Carlo, hvilket netop skyldes at de usikre parametre tildeles meget brede intervaller og at der ofte anvendes uniforme fordelingsfunktioner. Dette gør at parameterrummet, der kan samples i, er meget stort med mange mulige kombinationer. Det kan derfor være nødvendigt at udføre flere tusinde modelkørsler. En anden ulempe er, at der skal defineres nogle likelihood funktioner. Jo strengere krav der opstilles, jo flere kombinationer vil der blive forkastet, og det accepterede parameterum indskrænkes. Valget af likelihood funktioner vil således påvirke det endelige resultat mht. de beregnede usikkerhedsintervaller, hvilket også har været diskuteret af bl.a. Christensen (2004). Metoden har primært været anvendt i forbindelse med forskning, og der sker en stadig udvikling af metode.

19.6.4 MODFLOW2000

De fleste af de tilgængelige inversionsrutiner har indbygget procedurer til estimering af usikkerheden på modelsimuleringerne (prediktions analyse, på eng: predictive analysis), dette gælder eksempelvis UCODE (Poeter and Hill, 1998) og optimeringsrutinen indbygget i MODFLOW2000 (Hill et al., 2000) der begge bygger på den samme metodik. Usikkerheden på prediktionerne beregnes semi-analytisk på basis af den beregnede varians-kovarians matrice (ligning 14.14) samt en beregning af hvor følsom prediktionsværdien er overfor ændringer i modelparametrene, dvs. der beregnes en Jacobi matrice som 14.12, hvor prediktionsværdien indsættes som den afhængige variable. Output fra usikkerhedsanalysen kan være enten konfidensintervaller for prediktionsværdierne eller konfidensintervaller for ændringer. Sidstnævnte mulighed betyder at der beregnes en usikkerhed på forskellen mellem en reference situation (f.eks. nuværende forhold) og en scenarie kørsel (f.eks. ændret indvindingsstrategi), fremfor usikkerheden på de absolutte størrelser for scenarie kørslen. Den grundlæggende idé er, at prediktionsværdien opfattes som en observationsværdi, og de statistiske størrelser for prediktionsværdien udregnes som tilfældet er for observationsværdierne under kalibreringen.

Udførelse: Basalt set går det ud på, at få den relevante prediktionsværdi defineret som en observationsværdi. Alt efter den anvendte GUI understøttes muligheden for prediktionsanalysen i forskellig grad, og arbejdet med opsætningen af de nødvendige filer varierer således også. Understøtter den anvendte GUI ikke analyse af usikkerhederne på prediktionsværdierne kan man anvende programmet "MOD-Predict" der kan downloades fra <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow.html> med tilhørende dokumentation. Programmet giver flere muligheder for en usikkerhedsanalyse end dem der er indbygget i MODFLOW2000, og kan anvendes direkte med MODFLOW2000 filer. Endvidere er outputtet fra MOD-PREDICT specielt formateret til en grafisk præsentation af resultaterne.

Fordele:

- Kræver relativt få modelkørsler
- Kræver begrænset user input

Ulemper:

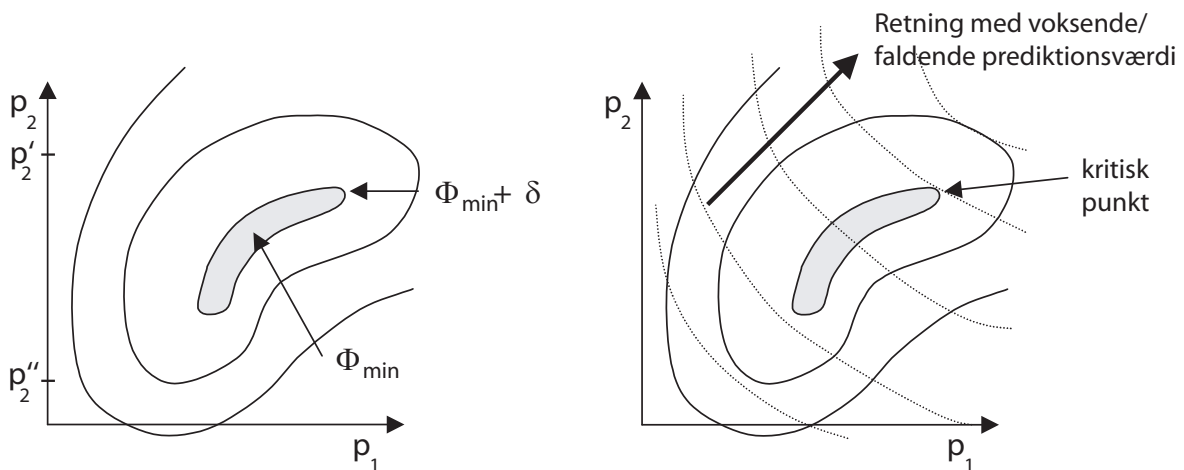
- Den output variabel der ønskes en usikkerhedsvurdering for, skal kunne defineres som en observationsværdi. Metoden er derfor begrænset til output typer der ville kunne anvendes som kalibreringstargets, dvs. potentiale, tidslig ændring i potentiale, afstrømning, udveksling med fastholdt tryk rand og stofkoncentrationer (advektiv transport)
- Konfidensintervallerne for prediktionsværdierne beregnes ud fra en antagelse om model linearitet omkring optimum.

19.6.5 PEST

Metoden i PEST (Doherty, 2004) adskiller sig væsentligt fra den der anvendes i MODFLOW2000. I PEST er den underliggende filosofi, at det interessante er ekstremerne, f.eks. vil det mest interessante i forbindelse med en forureningstrussel ofte være, hvornår det tidligste gennembrud kan forventes samt hvad den maksimale koncentration vil blive. I stedet for at anvende en analytisk løsning, med de uundgåelige antagelser om linearitet, tager PEST afsæt i, at optimere prediktionsværdien, dvs. finde den maksimale eller minimale prediktionsværdi, der er mulig for den givne model. Denne maksimering/minimering bliver dog begrænset ved, at modellen samtidig kræves at være kalibreret på et acceptabelt niveau, defineret på basis af en acceptabel værdi for objektiv funktionen

Udførelse: Analysen udføres ved, at der subjektivt angives hvilken værdi objektiv funktionen maksimalt må antage, for at modellen stadig vurderes at være kalibreret på et acceptabelt niveau. Dette er illustreret på figur 19.5 for et simpelt tilfælde med to parametre, hvor Φ_{min} er minimumsværdien for objektiv funktionen, dvs. værdien for objektiv funktionen for den færdig kalibrerede model, og δ er den subjektive valgte tilvækst i objektiv funktionen, der tillades for at modellen stadig accepteres at være kalibreret. PEST benytter da sin optimeringsalgoritme til at finde den parameter kombination der giver den største (mindste) prediktionsværdi, samtidig med at objektiv funktionen ligger indenfor det skraverede areal $\Phi_{min} + \delta$. Denne parameterkombination benævnes det kritiske punkt.

Er PEST ikke indbygget i den anvendte GUI kan programmet samt manual downloades fra <http://www.sspa.com/pest/index.htm>.



Figur 19.5 Illustration af objektiv funktion i to-dimensionalt parameterum. Til venstre ses optimum (Φ_{min}) og tilladelig værdi af objektiv funktion ($\Phi_{min} + \delta$). På figuren til højre illustrerer de skitserede linier konturer af prediktionsværdien, og det kritiske punkt er angivet. Figureerne er baseret på Doherty (2004).

Fordele:

- Sammenlignet med Monte Carlo og GLUE kræver metoden relativt få modelkørsler. Hvor mange modelkørsler der er nødvendig afhænger af hvor "nemt" det kritiske punkt kan findes, hvilket i de fleste tilfælde er vanskeligere end at finde objektiv funktionens minimum, dvs. optimeringen. Metoden vil altid kræve flere modevalueringer end metoden i MODFLOW2000.
- Det er muligt at få en vurdering af "worst-case", med den anvendte modelstruktur (herunder parameteriseringen) under hensyntagen til, at modellen stadig skal kunne fitte observationsværdierne acceptabelt.
- Kræver begrænset user input
- Er ikke så følsom overfor model linearitet som MODFLOW2000 metoden

Ulemper:

- Der kan kun beregnes usikkerhed for én prediktionsværdi ad gangen. Den parameterkombination der fører til worst-case for et koncentrationsniveau er ikke nødvendigvis den samme, der fører til worst-case i en anden observationsboring.
- Der beregnes ikke statistik for hvor sandsynlig worst-case situationen er
- Den maksimale tilvækst i objektive funktionen (δ) er afgørende for analysen, og denne skal angives subjektivt.

19.6.6 T-PROGS

T-PROGS (Transition PROBability Geostatistical Software) tilhører de stokastiske metoder. Metoden erkender, at vi aldrig vil være istand til at give en deterministisk og fuldstændig beskrivelse af de geologiske forhold, men i bedste fald vil være i stand til at karakterisere heterogeniteten statistisk. Metodens navn refererer til, at man forsøger at beskrive transition probabilities, dvs. sandsynligheden for forskellige hydrofacies overgange (overgangssandsynligheder), f.eks. sandsynligheden for et skift fra "ler" til "sand" over en given afstand i det horisontale eller vertikale plan. Foruden sandsynlighederne tager metoden højde for fysiske parametre, såsom volumenfordeling, altså hvor meget der er af hver facies, og middellængder, der kan være de horisontale middellængder for sandlinser indesluttet i en lerformation eller en middel tykkelse af en enhed. På baggrund af sandsynlighederne genereres forskellige realisationer af mulige hydrogeologiske modeller, der alle tilgodeser sandsynlighederne for skift samt de fysiske parametre, ligesom det sikres, at de rigtige facies optræder, der hvor de er observeret (conditional simulation). Metoden adskiller sig fra de fleste andre stokastiske metoder ved, at det er de geologiske facies der er den stokastiske variable, og ikke de hydrogeologiske karakteristika såsom den hydrauliske ledningsevne. Den stokastiske størrelse opfattes som en diskret størrelse (kategori/ indikator) fremfor en kontinuert fordeling. Realisationerne genereres derfor i T-PROGS ved indikator kriging, der gør det muligt at bevare skarpe afgrænsninger mellem de hydrologiske enheder, og dermed skarpe afgrænsninger i den hydrauliske ledningsevne. Til trods for at metoden blev udviklet midt i 90'erne, findes der kun få eksempler på at metoden har været anvendt i praksis. Nogle GUIs er dog begyndt at understøtte T-PROGS (bl.a. GMS), og der er således chance for at metoden vil blive anvendt mere i fremtiden. Metoden er beskrevet detaljeret i T-PROGS manualen, efter registrering kan denne downloades frit fra <http://www.bossintl.com/products/dpdf/files/ftp/dir/01402/pdf/t-progs.pdf>

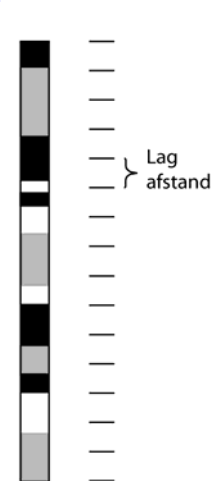
$$t_{jk}(h) = \Pr(j \text{ optræder ved } x+h \mid k \text{ optræder ved } x)$$

Udførelse: Metoden kræver en del forarbejde mht. analyse af det geologiske materiale, dette indbefatter eksempelvis en opdeling i kategorier, f.eks. "ler", "sand", "grus", Figur 19.6. Herefter genereres overgangssandsynlighederne der er den betingede sandsynlighed at kategori j optræder på position $x+h$, hvor h er lag afstanden, når kategori k optræder på positionen x . Med overgangssandsynlighederne og de fysiske størrelser som proportioner og middel længder genereres der Markov kæder, ud fra hvilke der kan genereres et ønsket antal realisationer af mulige fordelinger af de geologiske facies. For hver realisation kan der så, som ved Monte Carlo simuleringerne, gennemføres en beregning og resultaterne kan angives som en sandsynlighed fremfor en absolut værdi.

Fordele:

- Metoden gør det muligt at bevare skarpe skel mellem forskellige facies.
- Det er muligt at inddrage geologisk information direkte, eksempelvis ved definering af middellængde, volumenfraktion og overgangssandsynligheder.

Ulemper:



Figur 19.6 Opdeling af kerne i kategorier.

- Metoden understøttes endnu kun af få GUIs.
- Den bagvedliggende matematik er relativt kompliceret. Selvom der anvendes en GUI der gør databehandlingen og generering af realisationer overkommelig, er det nødvendigt med et minimum af forståelse af matematikken.
- Metoden kræver stationaritet, dvs. den geologiske heterogenitet skal være ens i det betragtede område. Dette betyder i praksis at et område dannet under varierende geologiske forhold typisk skal inddeles i forskellige delområder med hver deres overgangssandsynligheder.

19.6.7 Følsomhedsanalyse

Følsomhedsanalyse udføres til at belyse hvor stor betydning én variabel har på modelresultatet. Metoden anvendes ofte i forbindelse med både kalibrering og usikkerhedsvurdering. Under kalibrering anvendes følsomhedsanalyse til at identificere hvilke variable, der har mest indflydelse på modelresultatet, og som man derfor skal koncentrere sig om i kalibreringen. Ved en usikkerhedsvurdering kan man anvende en følsomhedsanalyse, hvis der ikke er tilstrækkelig kendskab til variabelen til en fuldstændig statistisk karakterisering. Måske er det kun muligt at give et realistisk bud på en minimum/maksimumsværdi uden noget kendskab til sandsynlighedsfordelingen. Følsomhedsanalyse har dog også ofte været anvendt som en erstatning for Monte Carlo simuleringerne, da en følsomhedsanalyse ikke er nær så tidskrævende.

Udførelse: Når en følsomhedsanalyse anvendes til belysning af en modelusikkerhed gøres det ofte ved at udvælge nogle få variable i den kalibrerede model. De udvalgte variable er dem, som man enten ved har en stor følsomhed, f.eks. fra erfaringer gjort under kalibreringen, eller som man har en mistanke om vil have en stor betydning, f.eks. en randbetingelse. Der foretages nu en række modelkørsler, hvor de udvalgte variable varieres én ad gangen, og effekten heraf monitoreres ved at observere, hvor meget en given output variabel ændres. Et eksempel kan være en model, der skal give et estimat på grundvandsdannelsen til en bestemt dybde, hvor en følsom variabel i denne forbindelse er nettonedbøren. Har man ikke tilstrækkelig information til en statistisk karakterisering af nettonedbøren, men tilstrækkelig information (f.eks. fra andre projekter) til en vurdering af variationen af nettonedbøren, f.eks. +/- 20%, kan man anvende en følsomhedsanalyse. Udfra en reference situation (der er den kalibrerede model) observeres, hvor meget grundvandsdannelsen ændres når nettonedbøren justeres hhv. 20% op og ned.

En følsomhedsanalyse er en meget nyttig øvelse i forbindelse med kalibrering, da det synliggør hvilke variable (ofte modelparametre) der er mest følsomme, og som man derfor skal koncentrere sig om i forbindelse med kalibreringen. I forbindelse med en usikkerhedsanalyse skal man imidlertid være mere varsom med anvendelse af en følsomhedsanalyse for modelparametrene. Forestiller vi os en simpel model med blot to parametre, vil vi efter en succesfuld kalibrering have fundet punktet Φ_{min} på figur 19.5. Udfører vi nu en følsomhedsanalyse for p_2 ved at ændre værdien til p_2' og p_2'' vil vi i begge tilfælde have flyttet os langt fra den optimale parameterkombination (minimum af objektiv funktionen). Modellen vil derfor ikke længere kunne accepteres som værende kalibreret, og det er altså ikke meningsfuldt at observere variationen i model outputtet.

Fordele:

- Kræver meget få ressourcer at udføre, både mht. opsætning af filer, eksekvering og efterfølgende analyse. Nogle GUIs indeholder rutiner specielt skræddersyet til udførelse af følsomhedsanalyser.
- Det er muligt at belyse usikkerheden af enhver type af variabel, f.eks. rand, input data og modelparametre.

Ulemper:

- Der stilles ikke krav mht. en vurdering af, hvor sandsynlig de anvendte parameterverdier er, og dermed hvor sandsynlig outputtet er.
- Ændring af en variable vil potentielt kunne føre til at modellen ikke længere er kalibreret, hvorfor den undersøgte værdi for variabelen må forkastes ligesom den observerede effekt.
- Der kan ikke tages højde for en indbyrdes korrelation mellem parametre.

19.6.8 Multiple Model Simulation

Opstilling af enhver model starter med opstilling af en konceptuel model, dvs. en sammenfatning af vores forståelse af strukturen af det fysiske system, og hvilke processer der er gældende, se også kapitel 3 og 4. Den færdige models evne til at simulere det fysiske system er i høj grad afhængig af, hvor godt vi i første omgang har forstået systemet og repræsenteret det i den numeriske model. En fejlagtig konceptuel model vil ofte have stor betydning for modelresultatet, og usikkerheden i den konceptuelle model er således ofte den mest betydende usikkerhed (f.eks. Neumann & Wierenga, 2003; Højberg & Refsgaard, 2005).

Et velkendt eksempel på usikkerhed i den konceptuelle model indenfor grundvandsmodellering er den geologiske/hydrogeologiske model. Det vil aldrig være muligt, at få en fuldstændig opløsning af de geologiske enheder, hvorfor der skal foretages en tolkning af geologien/hydrogeologien i forbindelse med enhver grundvandsmodellering. Da tolkningen netop går ud på at udfylde "hullerne" i de områder hvor vi *ikke* har kendskab til geologien, vil det være muligt at opstille mange forskellige konceptuelle modeller. Sålænge disse alternative konceptuelle modeller er i overensstemmelse med de tilgængelige geologiske og geofysiske data, vil de alle være sandsynlige modeller, som det ikke er muligt at diskriminere mellem. Den eneste mulighed for at belyse betydningen af usikkerheden på den konceptuelle model (også benævnt model struktur), vil være at anvende samtlige troværdige alternative modeller sideløbende. Usikkerhed på den konceptuelle model er ikke begrænset til usikkerheden på hydrogeologien, men omhandler også usikkerheden mht. hvilke processer der foregår i naturen, deres interaktion og hvordan de bedst repræsenteres i den numeriske model.

Udførelse: Den mest ligefremme udførelse er, at lade forskellige personer opstille hver deres model. De alternative modeller, der herved fremkommer, vil da afspejle de enkelte personers konceptuelle forståelse af såvel hydrogeologien og de styrende processer, samt deres vurderinger af hvilke antagelser og simplificeringer, der er acceptable. Opstilling af den konceptuelle model er imidlertid en meget ressourcekrævende proces, og for de fleste modeljob vil det være en uoverkommelig opgave at skulle opstille flere forskellige konceptuelle modeller helt fra bunden. Alternativt kan der under konstruktionen af en konceptuel model fokuseres på usikre forhold, der vurderes at have størst betydning for det endelige modelresultat. Der kan så efterfølgende opstilles alternative modeller, der varierer mht. de usikre forhold. Et eksempel kan være usikkerhed om eksistensen eller udbredelsen af en begravet dal. Der kan her opstilles alternative modeller hhv. med og uden dal eller mht. udformningen af dalen.

I nogle tilfælde vil det være muligt at forkaste én eller flere af de alternative konceptuelle modeller, f.eks. i tilfælde hvor modellen ikke kan simulere grundvandspotentialet acceptabelt ved anvendelse af realistiske parameterværdier. Alternativer, der ikke kan forkastes, må accepteres som mulige løsninger. Det vil ikke være muligt at associere de enkelte alternativer med en absolut sandsynlighed, men gennem en faglig diskussion, hvor alle relevante informationer inddrages (geologisk/geofysisk data, dannelsehistorie, kemi data, etc.), vil det i nogle tilfælde være muligt at tilskrive nogle af alternativerne en større relativ sandsynlighed end andre.

Multiple model simulering kan ses som en (kompleks) udgave af en følsomhedsanalyse. I stedet for at teste betydningen af én variabel testes blot betydningen af én struktur. I en traditionel følsomhedsanalyse vil det ofte være muligt at give nogle rimelige bud på variationsbredden for en variabel (f.eks. minimums- og maksimumsværdier). Dette er imidlertid ikke muligt mht. usikkerheden på den konceptuelle model, og et springende punkt i multiple model simulering er afgørelsen af, hvornår udfaldsrummet af mulige konceptuelle modeller er gennemført tilstrækkeligt, til at få usikkerheden på grund af strukturfejl belyst tilstrækkeligt.

Fordele:

- Gør det muligt at belyse betydningen af usikkerheden på den konceptuelle grundvandsmodel eksplicit.
- Det er muligt at inddrage ekspertviden i vurderingen af mulige alternative konceptuelle modeller, inklusiv viden fra forskellige fagområder såsom geologi og geokemi.

- Promoverer en detaljeret diskussion af systemforståelsen, og reducere risikoen for at have overset vigtige forhold.

Ulemper:

- Vurderingen af alternativer er subjektiv og derfor afhængig af personerne i modelteamet samt deres erfaringer.
- Det kan ikke garanteres at alle relevante alternativer har været afprøvet.
- Det er ikke muligt at give en sandsynlighed for de enkelte alternativer, ofte vil det end ikke være muligt at give en relativ vurdering.

19.6.9 Ekspertvurdering

Ekspertvurdering dækker over en subjektiv vurdering af usikkerheden foretaget af en ekspert. En ekspertvurdering er ofte det eneste alternativ i de tilfælde, hvor vi ikke kender hele udfaldsrummet for en variabel, eller ikke har tilstrækkeligt med empirisk data til statistisk karakterisering af usikkerheden. I disse tilfælde bliver vi nødt til at vurdere f.eks. minimums- og maksimumsværdier, der kan benyttes i en følsomhedsanalyse til vurdering af "worst-case", eller give et bud på en fordelingsfunktion, hvis målet er en statistisk usikkerhedsvurdering. Et eksempel kan være, at der for nettonedbøren er beregnet én (deterministisk) værdi, f.eks. ved anvendelse af en given model, og der er enighed om, at denne størrelse er usikker, men der findes ingen hårde data til at kvantificere usikkerheden. I denne situation kan en erfaren person give et bud på et forventeligt interval, f.eks. baseret på tidligere studier og kendskab til andre modeller i det pågældende område. Gøres der tillige en antagelse om sandsynlighedsfordelingen (eksempelvis normalfordeling), kan der således konstrueres en sandsynlighedsfordeling for nettonedbøren, baseret på en ekspert vurdering.

Ekspert vurdering indgår implicit i enhver usikkerhedsanalyse, da første step altid er en vurdering af, hvilke usikkerhedskilder der skal belyses yderligere.

Udførelse: Ekspertvurdering reflekterer ekspertens tillid til en given variabel, og er således en subjektiv vurdering. Da forskellige personer vil have forskellig tillid til eksempelvis de metoder data er fremskaffet på (feltstudier, modeller etc.), vil der også være forskellige bud på usikkerheden. Det kan derfor være en god idé at inddrage flere eksperter i vurderingerne i et forsøg på at undgå bias. Ved at opnå konsensus omkring usikkerheden mellem flere eksperter, styrkes tilliden til de subjektive usikkerhedsintervaller. Man kan selvfølgelig også risikere, at der ikke kan opnås konsensus og man skal da vælge, om der skal foretages en aggregering af de estimerede usikkerheder, eller om man har større tiltro til én/nogle af eksperterne fremfor andre.

Da der er tale om subjektive vurderinger og valg, er det vigtigt at ekspertvurderingen dokumenteres detaljeret, så det bliver gennemskueligt, hvordan usikkerheden blev fastsat, f.eks. af hvem og på hvilket grundlag (videnskabelige undersøgelser, andre modeller i området, erfaring generelt o.s.v.)

Fordele:

- Det er muligt at inddrage al viden, herunder erfaringer fra lignende opgaver og information der ikke ellers kan formaliseres.
- Graden af uenighed blandt eksperter synliggøres

Ulemper:

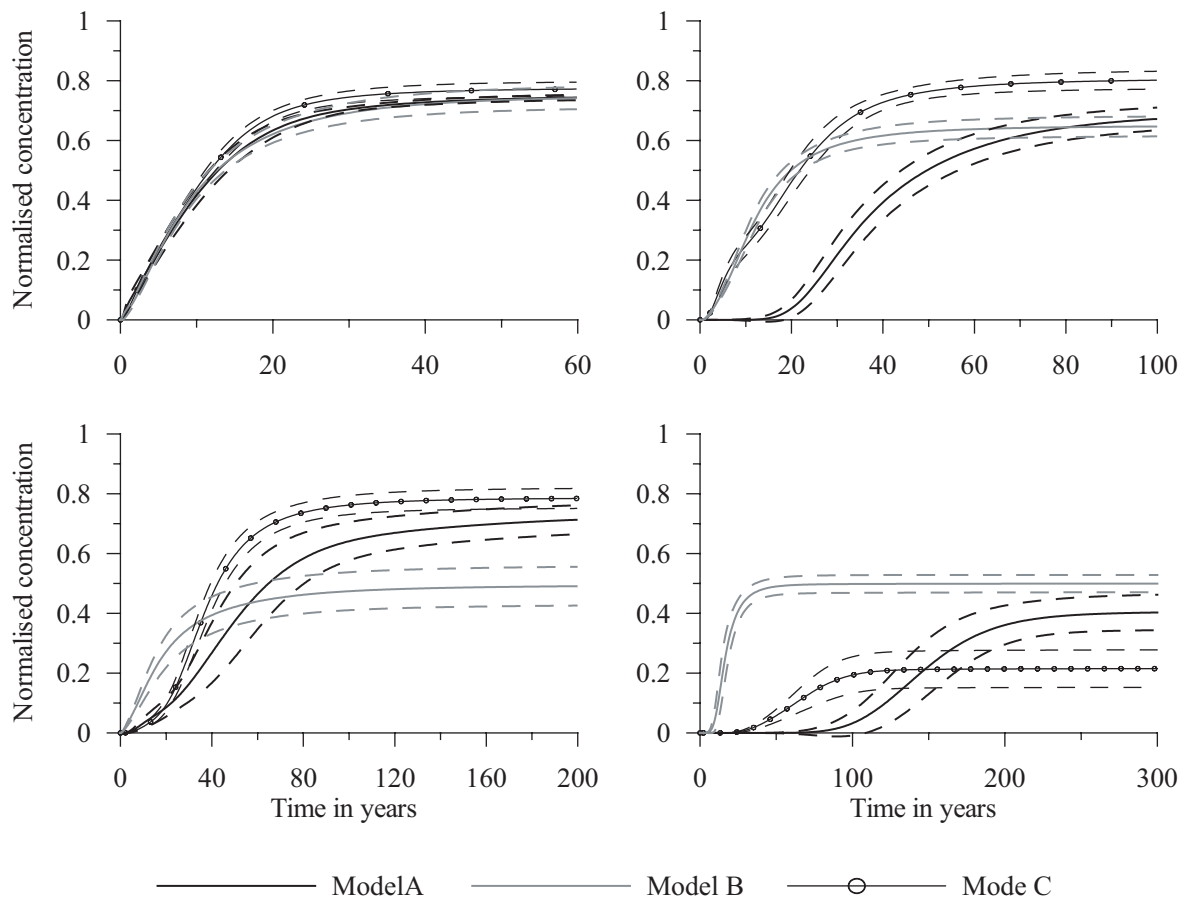
- Metoden er subjektiv og udfaldet vil afhænge af valget af eksperter.
- Sandsynligheden for at en vurdering er korrekt er ikke ligefrem proportional med antallet af eksperter der deler denne vurdering.
- Hvis eksperterne er uenige kan det være svært at vægte de forskellige vurderinger indbyrdes.

19.7 FALDGRUBER OG KRITISKE PROBLEMSTILLINGER

I forbindelse med en usikkerhedsvurdering er der to overordnede faldgruber:

1. Manglende identificering og dokumentation af usikkerhedskilder
2. Manglende kendskab til teori og antagelser

Det første punkt vedrører problematikken omkring identificering af usikkerhedskilder og en overskuelig dokumentation samt prioritering af disse. Vægtes denne identificering og prioritering ikke tilstrækkeligt, er der to oplagte faldgruber: a) væsentlige usikkerhedskilder identificeres ikke, b) de usikkerhedsbidrag, der inddrages i usikkerhedsanalysen, er ikke de mest betydende bidrag. Et ofte set eksempel er, at usikkerhedsanalysen foretages ved en propagering af parameterusikkerheden, ved eksempelvis Monte Carlo simuleringer, uden betydningen af denne usikkerhed er vurderet i relation til øvrige usikkerhedskilder. De grundvandsmodeller der anvendes i Danmark, tilhører primært gruppen af distribuerede mekanistisk baserede modeller (eller proces orienterede modeller)



Figur 19.7 Simuleret koncentration i fire indvindingsboringer for tre konceptuelle modeller (A, B og C). Stiplet linier angiver 95% konfidensintervaller under antagelse af usikkerhed på modelparametre og input data alene, ved Monte Carlo simuleringer.

såsom f.eks. MODFLOW og MIKE SHE. Til afvikling af disse modeller skal der estimeres et stort antal model parametre, ligesom der skal specificeres input data. Da både parametre og data er behæftet med usikkerhed er det logisk at antage, at disse størrelser, som minimum, bidrager væsentligt til den samlede usikkerhed. Men herfra kan der ikke sluttes, at parametre og input data altid

udgør det væsentligste usikkerhedsbidrag. Dette er bl.a. illustreret af Højberg & Refsgaard (2005), hvor betydningen af usikkerhed i den geologiske model er sammenlignet med usikkerheden relateret til modelparametrene. Tre uafhængige hydrogeologiske modeller blev konstrueret og kalibreret, hvorefter parameterusikkerheden for hver af modellerne blev kvantificeret ved Monte Carlo simuleringer. Analysen viste, at det ikke var muligt at beskrive den totale usikkerhed ved en propagering af usikkerheden på modelparametrene alene. Variationen mellem de konceptuelle modeller var mindst for de variable, der var anvendt i kalibreringen såsom hydraulisk trykniveau. I forbindelse med transportsimuleringer var forskellen mellem de konceptuelle modeller til gengæld så stor, at parameterusikkerheden reelt var ubetydelig, figur 19.7. Havde usikkerhedsanalysen i dette tilfælde kun inkluderet parameterusikkerheden, står det klart at den reelle usikkerhed var blevet kraftig underestimeret, og vi havde fået en falsk tillid til modellens troværdighed. Eksemplet illustrerer vigtigheden af, at der foretages en usikkerhedsvurdering mht. hvilke kilder der er, og hvilke der har størst betydning, så ressourcerne kan anvendes bedst for opnåelse af "mest sikkerhed for pengene".

En anden type af faldgruber er relateret til udøverens kendskab til den bagvedliggende teori, og herunder specielt hvilke forudsætninger og antagelser der er gjort i forbindelse med udviklingen af teorien. I takt med at flere og flere GUIs tilbyder skræddersyede rutiner til afvikling af en usikkerhedsanalyse, bliver det både hurtigere og lettere at udføre disse analyse, og fordrer kun ringe eller slet ingen kendskab til teorien bag metoderne. Uden et minimum af kendskab til teorien kan man risikere at anvende en metode i tilfælde, hvor de nødvendige antagelser ikke er opfyldte, og analysen derfor, i bedste fald, kun giver en approksimativ kvantificering. Et manglende kendskab til den anvendte metode kan endvidere føre til en fejltolkning af resultatet, samt manglende kvalificeret bud på styrken af den anvendte analyse. Disse forhold vil ligeledes kunne føre til en falsk tillid til vores kendskab til usikkerheden. En anden faldgrube i forbindelse med den anvendte GUI er, at det er nærliggende at anvende den usikkerhedsanalyse, der understøttes af GUI'en, uden en egentlig vurdering af hvorvidt denne metode er den optimale.

19.8 REFERENCER

Christensen, S. (2004). A synthetic groundwater modelling study of the accuracy of GLUE uncertainty intervals. *Nordic Hydrology*, 35(1), 45-59.

Beven, K. and Binley, A. (1992). The future of distributed models - model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes*, 6(3), 279-298.

Brown JD (2004) Knowledge, uncertainty and physical geography: towards the development of methodologies for questioning belief. *Transactions of the Institute of British Geographers*. *Accepted*.

Doherty, J. (2004). Model independent parameter estimation (PEST). Manual. Watermark Numerical Computing. <http://www.sspa.com/pest>

Helton, J.C. and Davis, F.J. (2003). Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. *Reliability Engineering and System Safety*, 81, 23-69.

Hill, M.C., Banta, E.R., Harbaugh, A.W., Anderman, E.R. (2000). MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey modular ground-water model – User guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter-estimation processes and three post-processing programs, U.S. Geological Survey, Open-file Report 00-184, 209 p.

Hill, M.C. and Østerby, O. (2003). Determining extreme parameter correlation in ground water models. *Ground Water*, 41(4), 420-430.

Højberg, A.L. and Refsgaard, J.C. (2005). Model uncertainty - Parameter uncertainty versus conceptual models. *Water Science & Technology*, *submitted*

Neuman S.P. and Wierenga P.J. (2003). A comprehensive strategy of hydrogeologic modeling and uncertainty analysis for nuclear facilities and sites. NUREG/CR-6805, U.S. Nuclear Regulatory Commission.

Poeter, E. P., Hill, M.C. (1998) Documentation of UCODE, A computer code for universal inverse modeling: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 98-4080, 116 p.

Refsgaard, J.C. , van der Sluijs J.P., Højberg, A.L. and Vanrolleghem, P. (2005) Harmoni-CA Guidance, Uncertainty Analysis, <http://www.harmoni-ca.info>

Van der Sluijs, J.P., Janssen, P.H.M., Petersen, A.C., Klopogge, P., Risbey, J.S., Tuinstra, W. and Ravetz, J.R. (2004) RIVM/MNP Guidance for Uncertainty Assessment and Communication Tool Catalogue for Uncertainty Assessment. Utrecht University.
(<http://www.nusap.net/sections.php?op=viewarticle&artid=17>)

Walker, W.E., Harremoës, P., Rotmans, J., Van Der Sluijs, J.P., Van Asselt, M.B.A., Janssen, P., Kreyer von Krauss, M.P. (2003) Defining Uncertainty A Conceptual Basis for Uncertainty Management in Model-Based Decision Support. *Intergrated Assessment*, 4(1), 7-17.