



# **Teknisk vejledning til beregning af 3D Grundvandsdannelse med stokastiske beregninger**

**Inputdata til sårbare grundvands-  
dannende områder (SGO)**

**Revision 1.0**

Titel: Teknisk vejledning til beregning af 3D Grundvandsdannelse med stokastiske beregninger

Formål:

Formålet med vejledningen er at beskrive en ensartet og robust metode til beregning af 3D grundvandsdannelse og tilhørende usikkerheder, som danner grundlag for Miljøstyrelsens identifikation og afgrænsning af sårbare grundvandsdannende områder (SGO).

Udarbejdet af: NIRAS

Udarbejdet for: Miljøstyrelsen

Finansieret af: Miljøstyrelsen

Leveringsdato for rapport: 1. februar 2026

Udgiver: Miljøstyrelsen

Redaktion:

Martin Kynde (MST)

Thomas Nyholm (MST)

Anne Guldbæk Arvidsen (MST)

Claus Holst Iversen (MST)

Hafsa Mahmood (MST)

Dorte Seifert Teide (NIRAS)

Kim Madsen van't Veen (NIRAS)

ISBN: 978-87-7564-155-0

# Indhold

|           |                                                                |           |
|-----------|----------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1.</b> | <b>Indledning</b>                                              | <b>5</b>  |
| 1.1       | Flowdiagram/arbejdsgang                                        | 6         |
| 1.2       | 3D grundvandsdannende områder                                  | 7         |
| 1.2.1     | Definition på 3D grundvandsdannende områder                    | 7         |
| 1.2.2     | Vandbalance inden for 3D grundvandsdannende områder            | 8         |
| 1.3       | Nye kortlægninger vs. genanvendte modeller                     | 8         |
| <b>2.</b> | <b>Processeringsværktøj</b>                                    | <b>10</b> |
| 2.1       | Histogrammer og sammenligning med kemidata                     | 10        |
| 2.1.1     | Anvendelse af histogrammer og transporttider                   | 10        |
| 2.1.2     | Usikkerhed- og fejlkilder                                      | 11        |
| <b>3.</b> | <b>Modelopsætning</b>                                          | <b>12</b> |
| 3.1       | Modelvalg                                                      | 12        |
| 3.2       | Opsætning til flowberegninger                                  | 12        |
| 3.2.1     | Indvinding                                                     | 12        |
| 3.2.2     | Klimadata                                                      | 13        |
| 3.2.3     | Gemmemfrekvens                                                 | 13        |
| 3.3       | Opsætning af partikelbaneberegninger til test af IOL           | 13        |
| 3.4       | Opsætning af partikelbaneberegninger til 3D grundvandsdannelse | 13        |
| 3.5       | Processering af enkeltberegning til 3D grundvandsdannelse      | 14        |
| 3.6       | Kvalitetssikring af referencemodellen                          | 14        |
| 3.6.1     | Kvalitetssikring af strømningsberegning                        | 15        |
| 3.6.2     | Kvalitetssikring af IOL                                        | 15        |
| 3.6.3     | 3D grundvandsdannende områder                                  | 16        |
| <b>4.</b> | <b>Stokastiske modelopsætninger</b>                            | <b>17</b> |
| 4.1       | Udvælgelse af parametre                                        | 17        |
| 4.1.1     | Følsomhedsanalyse                                              | 17        |
| 4.1.2     | Parametervalg fra erfaringer                                   | 18        |
| 4.2       | Parametersæt til stokastiske beregninger                       | 18        |
| 4.2.1     | Nearly Orthogonal Latin Hypercubes                             | 18        |
| 4.2.2     | Null-space Monte Carlo                                         | 20        |
| 4.2.3     | Parametersæt fra kalibreringen                                 | 20        |
| 4.3       | Evaluerings af stokastiske modeller                            | 21        |
| 4.4       | Andre variable til usikkerhedsberegninger                      | 21        |
| 4.4.1     | Klimainput                                                     | 21        |
| 4.4.2     | Porøsiteter                                                    | 22        |
| 4.4.3     | Andre forhold                                                  | 23        |
| 4.5       | Processering af stokastiske realisationer til SGO              | 23        |
| 4.6       | Kvalitetssikring af stokastiske realisationer                  | 24        |
| <b>5.</b> | <b>Afslutning/opsummering</b>                                  | <b>25</b> |
| 5.1       | Anbefalet metode                                               | 25        |
| 5.1.1     | Modelopsætning                                                 | 25        |
| 5.1.2     | Stokastisk modellering                                         | 25        |

|           |                                                                                            |           |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 5.2       | Leverancer til SGO                                                                         | 26        |
| <b>6.</b> | <b>Referencer</b>                                                                          | <b>28</b> |
|           | <b>Bilag 1.Beskrivelse af processeringsværktøjet til grundvandsdannende oplande</b>        | <b>30</b> |
|           | <b>Bilag 2.Beskrivelse af processeringsværktøjet til kemisk validering og histogrammer</b> | <b>33</b> |
|           | <b>Bilag 3.MODFLOW: Eksempler på modelopsætning og stokastiske beregninger</b>             | <b>38</b> |
|           | Opsætning af partikler                                                                     | 38        |
|           | Ustruktureret grid                                                                         | 38        |
|           | Stop- og registreringszoner                                                                | 39        |
|           | MODPATH 7 opsætning i Groundwater Modelling System (GMS)                                   | 40        |
|           | <b>Bilag 4.MIKE SHE: Eksempler på modelopsætning og stokastiske beregninger</b>            | <b>41</b> |
|           | Opsætning af partikler                                                                     | 41        |
|           | Registreringszoner                                                                         | 41        |
|           | Udtræk af partikler                                                                        | 42        |
|           | Eksempel på Autocal opsætning til følsomhedsanalyse                                        | 43        |
|           | Eksempel på kørsler af stokastiske modeller                                                | 44        |

# 1. Indledning

Miljøstyrelsen (MST) udfører beregninger af 3D grundvandsdannelse (3D GVD) til indvindingsoplande (IOL) for at identificere sårbare grundvandsdannende områder (SGO). Beregningerne indeholder udførsel af stokastiske beregninger med referencemodellen, hvor realistiske alternative parametersæt testes, for derved at sikre et robust resultat. Resultaterne fra de stokastiske beregninger danner grundlag for identifikationen af SGO, men kan også bruges i forbindelse med udpegning af IOL og OSD.

I /1/ beskrives SGO som: *"Konceptet sårbare grundvandsdannende områder (SGO) henviser ikke til en stofs specifik sårbarhed, men repræsenterer en hydrologisk sårbarhed, udarbejdet på et robust fagligt grundlag. SGO identificeres inden for indvindingsoplande for eksisterende indvindingsboringer til almene vandforsyninger, hvortil der sker en betydelig grundvandsdannelse af relativt ungt vand fra terrænoverfladen. I SGO må det derfor antages, at der er en generelt øget risiko for, at vandopløselige stoffer fra overfladen kan transporteres til drikkevandsmagasinerne og til indvindingsboringerne, før de når at blive nedbrudt eller bundet i jordlagene."*

*Afgrænsningen af de nye SGO sker på baggrund af hydrologiske modeller, hvor det er muligt at beregne mængden af og alderen på det grundvand, som dannes til boringer og grundvandsmagasiner. For at sikre en robust afgrænsning af SGO undersøges flere parametre, som kan have betydning for alderen og mængden af grundvandet. På baggrund af fastlagte kriterier afgrænses de sårbare grundvandsdannende områder, hvor sandsynligheden for grundvandsdannelse er høj."*

Metodikken for beregning af 3D grundvandsdannelse til SGO blev fastlagt igennem pilotprojekt Fyn /2/ og /3/ samt efterfølgende testprojekter, f.eks. /4/, /5/ og /6/.

Nærværende udgør den tekniske vejledning for opsætning af modeller til beregning af 3D grundvandsdannende områder til både indvindingsboringer og magasiner, samt udførsel af stokastiske beregninger til brug for vurdering af robusthed af både disse områder samt for indvindingsoplande, hvor disse skal beregnes eller genberegnes. Vejledningen bør læses i sin helhed.

Det skal bemærkes, at usikkerheder på den geologiske model som udgangspunkt ikke medtages i usikkerhedsvurderingen. Erfaringer viser dog, at usikkerheden på den geologiske model med bl.a. huller i dæklag og kontakt mellem magasiner kan have stor betydning for, hvor og hvordan grundvandet strømmer til boringer.

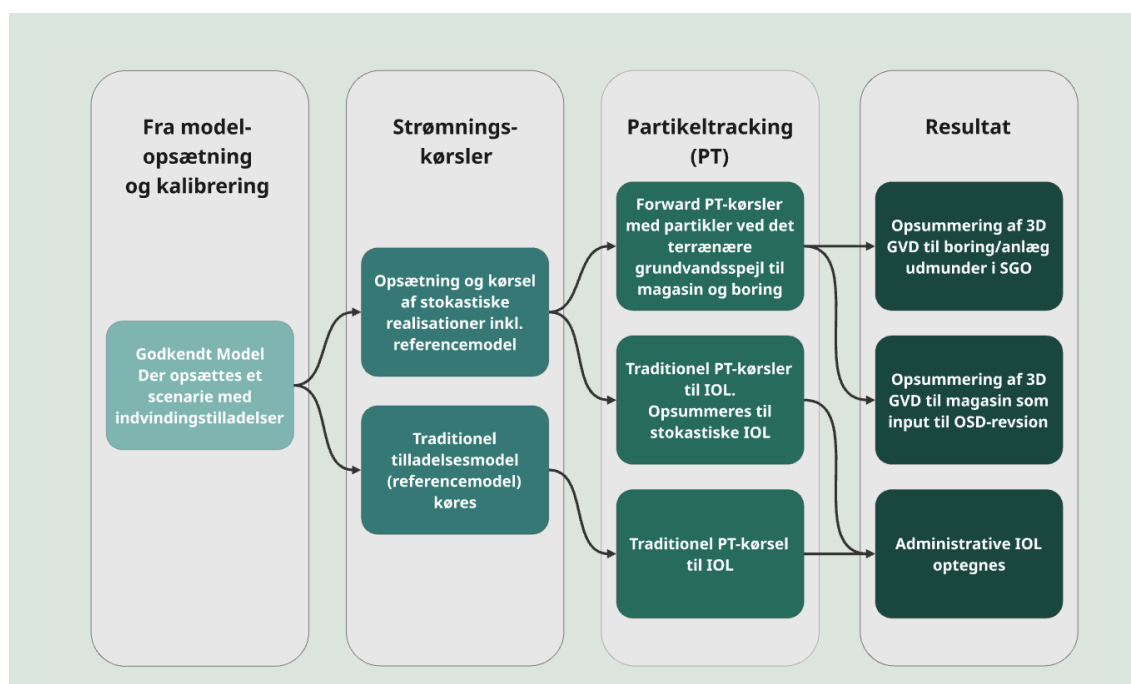
De stokastiske beregninger udføres på en grundvandsmodel, der er opsat i henhold til Miljøstyrelsens kravspecifikationer, /7/, og Miljøstyrelsens notat for administrative retningslinjer for hydrologisk modellering, /8/.

Nærværende dokument er opbygget, så det reflekterer den traditionelle arbejdsgang med grundvandsmodelleringsopgaven. Kapitel 2 beskriver processeringsværktøjet, der skal anvendes til håndtering af modelresultaterne til 3D grundvandsdannelse samt vurdering af transporttider. Kapitel 3 beskriver de rent tekniske elementer med opsætning af modellen og dataudtræk. Kapitel 4 omhandler, hvordan de stokastiske beregninger kan opsættes, med parametervalg og generering af parametersæt samt udvælgelse af modeller. Kapitel 5 indeholder en opsummering af processen og anbefalinger til metode.

I Bilag 1 findes yderligere informationer om processeringsværktøjet nævnt i Kapitel 2, som skal anvendes til dataprocesseringen samt oversigt over metadata til output filer. Bilag 2 indeholder information om den grundvandskemiske validering af transporttider samt beskrivelse af histogrammer for beregnede transporttider. Bilag 3 og Bilag 4 indeholder modelspecifikke opsætninger for hhv. en MODFLOW og en MIKE SHE-model, der ikke er indeholdt i afsnit 3 og 4.

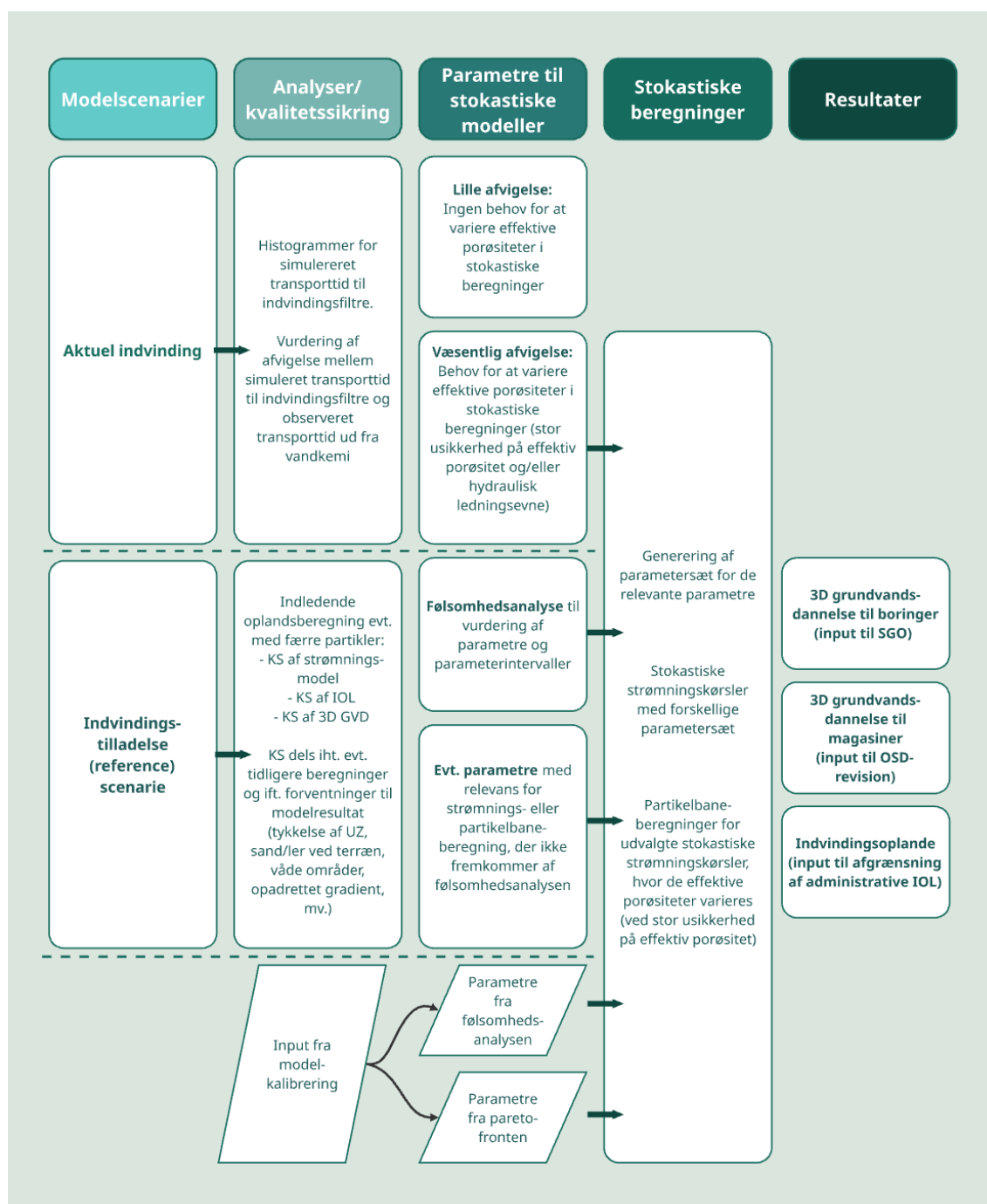
## 1.1 Flowdiagram/arbejdsgang

I FIGUR 1 ses en overordnet oversigt over arbejdsgangen fra den godkendte grundvandsmodel til resultater for tilladelsesscenariet med administrative indvindingsoplande (IOL) og sårbare grundvandsdannende områder (SGO). Det er muligt at fravælge processen "Partikeltracking (PT): Traditionel PT-kørsel til IOL. Opsummeres til stokastiske IOL", baseret på en konkret vurdering.



FIGUR 1. Overordnet **arbejdsgang** for beregning af indvindingsoplande og grundvandsdannende oplande. Det er muligt at fravælge processen "Partikeltracking (PT): Traditionel PT-kørsel til IOL. Opsummeres til stokastiske IOL", baseret på en konkret vurdering.

I FIGUR 2 ses et mere detaljeret flowdiagram, som primært adskiller sig fra FIGUR 1 ved at beskrive hvilke trin og overvejelser, der ligger i processen fra den godkendte model til opsætning af stokastiske beregninger til SGO og IOL.



**FIGUR 2.** Flowchart for processen, der leder frem til input til henholdsvis SGO, OSD-revision og afgrænsning af IOL, forud for den statistiske databehandling. Beregning af indvindingsoplande kan udelades, hvis disse tidligere er beregnet, og der ikke er sket væsentlige ændringer.

## 1.2 3D grundvandsdannende områder

### 1.2.1 Definition på 3D grundvandsdannende områder

De 3D grundvandsdannende områder til magasinerne defineres som områder, hvor der sker "Magasinspecifik grundvandsdannelse", som beskrevet i /10/ afsnit 5.14. Kort gengivet er det områder med grundvandsdannelse ved vandspejl, der bidrager med grundvandsdannelse til et specifikt magasin. Den magasinspecifikke grundvandsdannelse eller 3D grundvandsdannelsen udgør derfor en andel af den samlede grundvandsdannelse fra terræn til den mættede zone.

Til borerer betegner de 3D grundvandsdannende oplande ligeledes de områder på terræn, hvor grundvandsdannelse helt eller delvist ender i indvindingsboringerne.

Grundvandsdannelsen til magasiner og borerer betegnes med et "3D", da der fra terræn ned igennem lerdæklag og magasiner sker en både vertikal og horisontal strømning, inden vandet når et specifikt magasin eller boring.

I områder med sekundære magasiner over indvindingsmagasinerne kan der ske en horisontal strømning heri, og grundvandsdannelse ved terræn vil derfor ske et geografisk andet sted end der, hvor det ender i dybere magasiner eller i borerer. Med 3D grundvandsdannelsen opnås dermed et mere kvalificeret bud på sårbarheden af magasinerne, og i forhold til en samlet sårbarhedsvurdering af magasiner kan det være en stor fordel at tænke og visualisere strømningssituationerne i 3D.

3D grundvandsdannelse til et magasin eller boring kan beregnes ved hjælp af en partikelbane simulering, hvor partiklernes transport fra det øverste grundvandsspejl til toppen af magasinerne eller til indvindingsboringerne benyttes til at estimere hvor på terræn, grundvandsdannelsen til et magasin eller en boring sker. Den procentvise andel af partiklerne fra terræn, der ender i et magasin eller en boring, multipliceres med vandudvekslingen til den mættede zone, hvorved 3D grundvandsdannelsen til magasiner og borerer kan estimeres.

### 1.2.2 Vandbalance inden for 3D grundvandsdannende områder

Inden for de grundvandsdannende områder til et givet magasin er der for en stationær situation balance mellem den vandmængde, der infiltrerer som 3D grundvandsdannelse til det givne magasin, og den vandmængde, der strømmer til det givne magasin. Ligeledes er der for en stationær situation balance mellem 3D grundvandsdannelsen til borerer og mængderne borerer indvinder.

Modelberegninger af 3D grundvandsdannelse indbefatter usikkerheder og fejlkilder, som betyder, at den beregnede 3D grundvandsdannelse kun tilnærmer mængderne, borerer indvinder, og vandmængderne, der strømmer til magasinerne. En usikkerhed, der gør, at 3D grundvandsdannelsen underestimeres, introduceres f.eks. ved at begrænse beregningsperioden for partikelbaneberegningerne, således at vandmængder med stor transporttid ikke når frem til borerer eller de nederste magasiner, hvorved grundvandsdannelsen underestimeres. Denne usikkerhed på størrelsen af 3D grundvandsdannelse er særligt knyttet til dynamiske modeller. Usikkerheder på størrelsen af 3D grundvandsdannelse er også knyttet til antallet af partikler samt deres placering ved det øverste grundvandsspejl samt til den vertikale gennemsnitsflux, der ganges på andelen af partikler, der registreres i borerer og magasiner. En fejlkilde ved metoden, der ikke kan elimineres, er antagelsen om, at alle startpartiklerne i en beregningscelle repræsenterer den samme vandmængde, nemlig den vertikale gennemsnitsflux for beregningscellen divideret med antallet af startpartikler i beregningscellen.

Vurderinger af vandbalancen for den beregnede 3D grundvandsdannelse til borerer og magasiner foretaget for testområdet Lolland viser, at ved beregningstider for partikelbaner på 500 år underestimeres 3D grundvandsdannelse med 1-5% for de øverste magasiner og borerer med kort transporttid og op til 15-20% for magasiner og borerer med længst transporttid, /5/. Ved øgede beregningstider for partikelbaner på hhv. 1000 år og 4000 år reduceres fejlen af 3D grundvandsdannelse i testområdet til under 2 % for magasiner og borerer med kort transporttid hhv. under 10 % ved længere transporttider.

## 1.3 Nye kortlægninger vs. genanvendte modeller

Beregning af 3D grundvandsdannende områder til SGO for indvindingsboringer og magasin er fremadrettet en del af den almindelige kortlægningsopgave og vil derfor som udgangspunkt

indgå i alle nye hydrologiske modelleringsopgaver. Det forventes derfor ved beregningen af 3D grundvandsdannende områder, at overvejelser omkring parameterfølsomhed, specielle forhold mm., der kan være relevante ved fastlæggelsen af de stokastiske beregninger, vil indgå som en del af modelleringsopgaven gennem modelopsætningen og -kalibreringen.

For kortlægningsområder, der er afsluttet, skal der laves supplerende beregninger af 3D grundvandsdannende områder til SGO. I disse tilfælde er det relevant at se på afrapporteringen af modellen for at vurdere, om der er særlige forhold, der skal tages i betragtning. Ved genanvendelse af modeller kan det, som beskrevet ovenfor, være relevant at beregne nye IOL og BNBO, hvis der siden kortlægningen blev afsluttet er kommet nye relevante data til, sket ændringer i indvindingstilladelser, aktive borer og lign. Ved genanvendelse af en grundvandsmodel skal dette gøres i henhold til "Vejledning i genanvendelse af hydrologiske modeller", /9/. Derudover skal det sikres at modellen opfylder kvalitetskriterier og valg jf. Miljøstyrelsens notat for administrative retningslinjer for hydrologisk modellering, /8/.

## 2. Processeringsværktøj

Miljøstyrelsen har udviklet et processeringsværktøj til håndtering af resultatfiler fra beregning af 3D grundvandsdannende oplande for en hurtig og ensartet bearbejdning af data fra modelerne.

Værktøjet kan håndtere resultater af beregninger af grundvandsdannende områder fra både en enkelt modelkørsler og flere modelkørsler for et modelområde foretage opsummeringer for stokastiske realisationer, samt optegne histogrammer for transporttider og foretage udtræk af observerede kemidata til sammenligning med de beregnede transporttider.

Værktøjet er tilgængeligt via Miljøstyrelsens hjemmeside, /11/. Det forventes, at der altid benyttes den nyeste version, og at man følger den tilhørende dokumentation. Bilag 1 og dokumentationen til værktøjet, /11/, indeholder flere detaljer til anvendelse af værktøjet.

### 2.1 Histogrammer og sammenligning med kemidata

Nedenfor er anvendelse af processeringsværktøjet til histogrammer over transporttider kort beskrevet. Bilag 2 og dokumentationen til værktøjet, /11/, indeholder flere detaljer til in- og output. Bilag 2 indeholder desuden en beskrivelse af de grundvandskemiske data fra boringerne, der anvendes til sammenligning med simulerede transporttider.

#### 2.1.1 Anvendelse af histogrammer og transporttider

For at øge troværdigheden af en model, skal det bl.a. tilstræbes, at de beregnede transporttider er så realistiske som muligt. De beregnede transporttider er bl.a. en funktion af de anvendte effektive porøsiteter. Det er til enhver tid forventet at anvende de anbefalede porøsitetssværdier, hvis ikke analyser indikerer at noget andet er mere korrekt. Opsætningen af de anvendte partikelbaneberegninger, til at finde transporttiderne, er specificeret i afsnit 3.4.

For at vurdere om de beregnede transporttider er realistiske, kan de sammenholdes med tilsvarende observerede transporttider, som dækker over direkte transporttider i form af grundvandsdateringer og indirekte transporttider ud fra grundvandskemiske målinger. De indirekte transporttider vurderes ud fra koncentrationer af stoffer i grundvandet, der kan relateres til salgshistorikker for hvornår og i hvilket omfang, stofferne er anvendt i Danmark. Grundvandsdateringer er sjældne, så derfor vil vurderingen primært skulle foretages ud fra koncentrationer af primært miljøfremmede stoffer i grundvandet. De mest troværdige indirekte transporttider vurderes umiddelbart at kunne estimeres ud fra fund af svært nedbrydelige stoffer (f.eks. BAM eller PFAS).

For nye modeller forventes det, at processeringsværktøjet anvendes til vurdering af transporttiderne under kalibreringsprocessen. Herved er det muligt at overveje om uoverensstemmelser mellem transporttider og vandkemi afhænger af:

1. Den konceptuelle model
2. Parameterværdierne, der indgår i kalibreringen
3. De faste porøsiteter anvendt i modellen

Resultaterne heraf kan vise, om der er behov for at teste porøsiteterne i den aktuelle model, eller hvilke hydrauliske parametre, der kunne være gode at teste, selvom de ikke i første omgang er synlige i følsomhedsanalysen.

For genanvendte modeller kan sammenligningen medføre, at urealistiske beregnede transporttider giver anledning til gennemførsel af stokastiske beregninger med alternative effektive porøsiteter med henblik på at opnå mere realistiske beregnede transporttider til SGO.

Histogrammer over simulerede transporttider for den kalibrerede model med aktuelle indvindingsmængder vurderes at være mest realistiske, da de bedst repræsenterer den indvindingsstruktur, der aktuelt har været og dermed de trykniveauforskelle, vandpartiklerne har været udsat for på deres vej til indvindingsboringerne. Histogrammer over simulerede transporttider for tilladelsesmodellen svarer derimod til et scenarium, der kan være mere eller mindre repræsentativt i forhold til den indvindingsstruktur, der aktuelt har været.

For nye modeller optegnes histogrammer for en modelberegning med aktuelle indvindingsmængder, f.eks. gennemsnitlig indvinding for de seneste 5 år, hvorimod det kan accepteres at anvende referencemodellen med indvindingstilladelser for genanvendte modeller til at få et indtryk af forventet transporttider i et givet opland.

For dynamiske modeller kan histogrammerne ligeledes skabe forståelse for, om de grundvandsdannende oplande er fuldt udviklede, eller i hvilket omfang de er skåret af i forhold til afgrænsning af tiden for partikelbaneberegningen i modellen.

### 2.1.2 Usikkerhed- og fejlkilder

Aldersvurderinger ud fra pesticider og TFA bygger på anvendelsesår, og den beregnede minimumstransporttid skal derfor være kortere end disse aldersvurderinger, idet en del af grundvandet, der indvindes, skal være ungt nok til at være påvirket af pesticid- eller TFA-spredning. Fund af pesticid og TFA i boringer ved lange simulerede transporttider kan dog skyldes utætte boringer.

Partiklerne, der indgår i histogrammerne, er ikke relateret til indvindingsmængder, idet partikler der starter i forskellige modelceller repræsenterer forskellige vandmængder. Histogrammer kan derfor anvendes til at vise spændet af transporttider med minimums- og maksimumstransporttider, mens vurdering af middel- eller mediantransporttid til boringerne kan være fejlhæftede. De direkte aldersdateringer skal dog sammenlignes med en beregnet middeltransporttid, og skal bruges med forbehold.

Partikelbaneberegningerne i en numerisk model kan pga. forskellige forhold føre til både over- og underestimering af transporttiderne:

- Partikelbaneberegningerne foregår kun i den mættede zone. Transporttiden i den umættede zone skal således lægges til den beregnede transporttid i den mættede zone, såfremt denne udgør en betydelig del af den beregnede transporttid. Dette betyder i praksis, at de numeriske modeller underestimerer transporttiden, hvilket kan være vigtigt at tage højde for, når simulerede transporttider til en indvindingsboring sammenholdes med koncentrationer af grundvandskemiske stoffer målt boringen.
- Anvendelse af dynamiske modeller kan ligeledes føre til en yderligere underestimering af middeltransporttiden for boringer med lang transporttid, hvor den samlede simuleringsperiode (typisk 500 år) ikke er lang nok til, at alle partikler når frem til boringerne. Dvs. at det beregnede grundvandsdannende opland ikke svarer til det fuldt udviklede opland. Middeltransporttid anvendes til sammenligning med aldersdateringer med f.eks. Tritium/Helium-metoden.
- Partiklerne repræsenterer typisk, at stoffer bevæger sig ved den gennemsnitlige hastighed, og transporttiderne er derfor et udtryk for massemidtpunktet og ikke første ankomst. Der kan derfor ske en overestimering af minimumstransporttiderne.
- Modeller tager typisk ikke højde for f.eks. sprækketransport i ler og kalk eller utætte boringer. I disse tilfælde kan de beregnede transporttider ligeledes overestimeres.

## 3. Modelopsætning

I dette afsnit beskrives modelopsætningen for strømnings- og partikelbaneberegningerne til 3D grundvandsdannende områder, der ligger til grund for identifikation af SGO. Generelt tages der udgangspunkt i retningslinjerne for hydrologisk modellering til beregning af indvindingsoplande og grundvandsdannende partikler, /8/, og nedenfor beskrives specifikt opsætningen ift. grundvandsdannende områder til SGO.

Der vil være en forskel i arbejdsgangen alt efter om beregningerne foretages med en model, hvor kortlægningen er afsluttet, eller en ny-opsat model, hvor kortlægningen pågår, og SGO-beregningerne udføres som en integreret del af oplandsberegningerne, se afsnit 1.3. Ved en eksisterende model skal foretages en række opdateringer og test af modellen, som beskrevet nedenfor samt i /9/. I tilfælde af en ny model vil flere af disse delopgaver indgå som en del af kortlægningen.

### 3.1 Modelvalg

Udføres beregningen af de grundvandsdannende områder til SGO i forbindelse med en ny grundvandskortlægning kan dette afsnit springes over.

Anvendes en ældre grundvandsmodel skal der foretages en række kontroller inden beregningerne af grundvandsdannende områder indledes. Flere af disse er beskrevet i /9/, og som minimum skal følgende kontrolleres:

- Er det den korrekte grundvandsmodel til beregning af grundvandsdannende oplande til udvalgte vandværker?
- Er modellen den senest opdaterede, der ligger til grund for eksisterende indvindingsoplande?
- Er der sket ændringer i indvindingstilladelser og fordeling på aktive borer?
- Er placeringer af aktive indvindingsboringer korrekte, eller er borer evt. blevet genindmålt, således at koordinaterne til borerne skal opdateres?
- Svarer porøsiteten til de seneste anbefalede værdier?
- Er geologien retvisende og følgende gældende retningslinjer?
- Er der sket væsentlige opdateringer af geologien siden modellen blev sat op?
- Lever modellen op til MST's nuværende kvalitetskrav?
- Er filtersætningen korrekt og er borerne filtersat i det rigtige magasin?

Hvis der sker en ændring i et af ovenstående punkter, skal det kontrolleres, om de administrative indvindingsoplande skal genberegnes. Dette er beskrevet i /9/.

### 3.2 Opsætning til flowberegninger

#### 3.2.1 Underdiskretisering

Weak sinks, relateret til indvindingsboringer i modellen, der vurderes at have indflydelse på SGO, skal elimineres, ved at gøre beregningsgriddet finere horisontalt og/eller vertikalt.

#### 3.2.2 Indvinding

Beregning af 3D grundvandsdannende områder til SGO tager udgangspunkt i en reference-model med tilladelsesscenarie, hvor gældende indvindingstilladelser og aktive indvindingsboringer til de almene vandværker er opdateret i modellen, svarende til opsætningen til oplandsberegninger.

Til sammenligning af transporttider med grundvandskemien er det mest retvisende at anvende den aktuelle indvinding (se afsnit 2.2). For en dynamisk model kan der som "aktuel" indvinding anvendes en historisk indvinding pr. år eller en gennemsnitlig indvinding til de almene vandværker for f.eks. en 5-årig periode. Det er dog vigtigt, at der foregår indvinding fra boringerne i hele perioden for partikelbaneberegninger, da strømningsbilledet for evt. år uden indvinding fra enkelte boringer vil blive gentaget under partikelbaneberegningerne med risiko for, at partikler ikke registreres i boringerne i perioder uden indvinding. For beregninger med eksisterende modeller er scenariet med aktuel indvinding ikke altid tilgængeligt, hvorfor tilladelsesscenariet kan anvendes til at estimere transporttiderne.

Indledningsvist er det vigtigt at vurdere om der er behov for at foretage en underinddeling af de numeriske lag for at undgå tykke modellag med korte filtersætninger.

### 3.2.3 Klimadata

Til referencescenariet anvendes nuværende klima og om muligt den samme klimaperiode som til beregning af de administrative oplande. Under usikkerhedsberegningerne kan ændringer af det fremtidige klima medtages, se afsnit 4.4.2.

### 3.2.4 Gemmefrekvens

Ved dynamiske beregninger gemmes resultatfiler minimum hver måned i simuleringsperioden, for at resultaterne i tilstrækkelig grad repræsenterer det varierende strømningsbillede.

## 3.3 Opsætning af partikelbaneberegninger til test af IOL

Ved genanvendelse af en model til SGO-beregninger skal det vurderes, om opdateringer medfører ændringer i indvindingsoplandene (IOL) ift. gældende oplande. Der foretages derfor en partikelbaneberegning svarende til oplandsberegningerne beskrevet i /8/, som sammenlignes med eksisterende administrative oplande. Til sammenligningen er det rimeligt at udføre beregningen med et mindre antal partikler pr. celle, end der anbefales til optegning af oplande.

## 3.4 Opsætning af partikelbaneberegninger til 3D grundvandsdannelse

Referencemodellen og evt. modellen med aktuel indvinding sættes op til partikelbaneberegninger af 3D grundvandsdannende områder til boringer og magasiner.

Der er forskel på opsætningen af partikelbaneberegningerne alt efter hvilken modelkode og modelsoftware, der anvendes. Nedenfor er fællestrækkene beskrevet uafhængigt af modelværktøj, og i Bilag 3 og Bilag 4 er givet eksempler for opsætning i hhv. modelkoderne MODFLOW og MIKE SHE:

- Placering af 49 partikler pr. 100 m x 100 m beregningscelle. Ved anden diskretisering eller varierende celledørrelse (MODFLOW) skaleres antallet af partikler med celledørrelsen, således at der er mindst 49 partikler per hektar.
- Hvis der er tale om et ustruktureret quad-tree refined rektangulært grid, er der mulighed for, at foretage beregningerne af 3D grundvandsdannelse i et struktureret rektangulært grid, i stedet for. Det kræver dog, at 3D-grundvandsdannelsen til indvindingsboringerne beregnet med referencemodellen for henholdsvis det ustrukturerede og det strukturerede grid er tilnærmelsesvis ens, bedømt ud fra, hvilke arealer der bidrager med grundvandsdannelse til indvindingsboringerne. Der vil således kunne spares beregningstid, harddiskplads og processeringstid mv. Se Bilag 3 for yderligere information herom.
- Partiklerne udlægges i et uniformt lag i hele modellens domæne (f.eks. 7x7 partikler ved 100 m diskretisering). Antallet kan reduceres, f.eks. ved meget store modelområder. En test på et mindre område kan vise, om reduktion af partikelantallet giver sammenlignelige resultater. Der kan både være tale om at sænke antallet af partikler i hver celle eller at reducere området hvor partiklerne placeres.

- Partiklerne placeres så terrænnært (tæt på det øverste grundvandsspejl) som muligt, men samtidig under niveauet for dræn for at minimere antallet af partikler, der fjernes af dræn.
- Partikelbanerne beregnes *forward* i minimum 500 år for dynamiske modeller. For stationære modeller anbefales det at køre modellen til ende. Det kan i enkelte tilfælde være relevant at nedsætte beregningstiden, men dette er generelt ikke anbefalet, og skal aftales nøje med Miljøstyrelsen.
- For dynamiske modeller gentages strømningsbilledet for en repræsentativ periode på min. 5-10 år, f.eks. svarende til modellens kalibreringsperiode eller perioden tidligere anvendt til oplandsberegninger.
- For dynamiske modeller startes partiklerne, når grundvandet står lavest (typisk efterår/vinter) for at minimere antallet af partikler, der initialt forsvinder i dræn.
- Partiklerne registreres i indvindingsboringerne.
- Partiklerne registreres i indvindingsmagasinerne første gang de ankommer til en celle, der er defineret som magasin. Indvindingsmagasinerne er defineret ved magasiner, hvorfra der indvindes til de almene vandværker. Ved kalklag registreres partikler ved ankomst til toppen af det øvre kalklag.

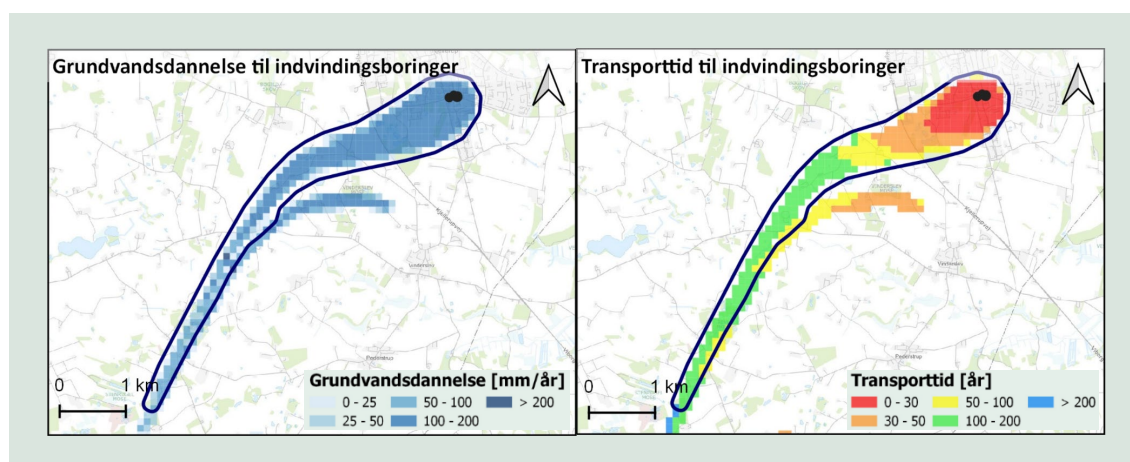
### 3.5 Processering af enkeltberegning til 3D grundvandsdannelse

Resultater fra referencemodellen med indvindingstilladelser og evt. aktuel indvinding anvendes i processeringstværværktøjet under fanen *Single model*, se afsnit 2.1 og Bilag 1.

Ud fra outputtet fra processeringstværværktøjet optegnes de grundvandsdannende områder til referencemodellen sammen med indvindingsoplandene tematiseret efter:

- minimums transporttider til boringer og magasiner
- grundvandsdannelse til boringer og magasiner

FIGUR 3 viser et eksempel på tematisering af grundvandsdannelsen og transporttider.



**FIGUR 3.** Eksempler på tematisering af grundvandsdannelse og minimums transporttider til boringer for referencemodellen fra /6/, vist med det administrative indvindingsopland.

### 3.6 Kvalitetssikring af referencemodellen

I forbindelse med udarbejdelsen af nye modeller forventes nedenstående overvejelser at indgå i modelkalibrering og -validering. Ved genanvendelse af afsluttede modeller er kvalitetssikring af modellen en vigtig del i vurderingen af, om modellen er tilstrækkelig til formålet.

Referencemodellen og resultater for testen af indvindingsoplande (IOL) samt de grundvandsdannende områder kvalitetssikres inden de stokastiske modeller sættes op. For de grundvandsdannende områder ses der på resultater både til magasiner og borer.

Resultaterne fra disse beregninger bruges til at sikre, at opsætningen af beregningerne er korrekt, samt at modellen giver de forventede resultater. Helt overordnet skal det vurderes, om resultaterne herfra ser fornuftige ud. Hvis der ud fra vurderingen er usædvanlige forhold, skal dette undersøges nærmere, og det kan give anledning til rettelser i modellen, samt input til valg af parametre i de stokastiske beregninger eller ændre parameterspændet.

### 3.6.1 Kvalitetssikring af strømningsberegning

Ud fra resultaterne med strømningsmodellen kvalitetssikres som minimum følgende:

- Det kontrolleres, at alle borerne kan indvinde den mængde, der er specificeret i modellen, og at filtrene ikke løber tørre.
- Der skal foretages en kemisk validering, hvor modellens transporttider opholdes imod kemien i indvindingsboringerne (jf. Afsnit 2.1)
- Der skal fremstilles et kort over tykkelsen af den øverste umættede zone. Dvs. afstanden fra terræn til det øverste grundvandsspejl. For MIKE SHE-modeller er det "top phreatic", kortet over tykkelsen af den umættede zone skal repræsentere. For dynamiske modeller skal kortet over tykkelsen af den umættede zone repræsentere det højeste niveau for det øverste grundvandsspejl som registreres (maksimumværdien). Kortet over tykkelsen af den umættede zone undersøges med fokus på større sammenhængende arealer inden for IOL med en tykkelse af umættet ler > 10 meter. Det undersøges om vandspejlet i disse områder passer med forventninger og eventuelle pejlinger af terrænnært vandspejl:
  - Viser beregningerne en for tyk umættet zone ift. observationer, bliver transporttiden fra vandspejl til borer og magasin underestimeret.
  - Generelt vil en tyk umættet zone have betydning for den samlede transporttid til borerne/magasinerne, da de beregnede transporttider kun medtager transporten i den mættede zone.
  - Transporttiden i den umættede zone kan evt. estimeres og sammenholdes med transporttiden i den mættede zone.
  - Såfremt det vurderes at tykkelsen af den umættede zone forårsager stor usikkerhed i modellens estimer af transporttid, bør dette tydeligt fremgå i afrapporteringen.

### 3.6.2 Kvalitetssikring af IOL

Partiklerne fra beregningen til indvindingsoplande beskrevet i afsnit 3.3 sammenholdes med de gældende administrative indvindingsoplande.

Følgende overvejelser bør foretages, men skal ikke ses som en fyldestgørende liste:

- Har IOL form, størrelse og retning som tidligere IOL/forventet?
- Beskriver IOL partiklerne udbredelsen af IOL tilfredsstillende:
  - Hvad er grunden til evt. huller i IOL?
  - Stemmer udbredelsen overens med geologien?

Ved overensstemmelse mellem de gældende administrative indvindingsoplande og den nye beregning bibeholdes de oprindelige IOL. Ved væsentlig uoverensstemmelse skal der foretages en vurdering af årsagen til forskellen, og om oplandene skal genberegnes, f.eks.:

- Er der sket en betydelig ændring i indvindingsmængder eller fordelinger på boringerne?
- Er der foretaget opdateringer af modellen siden oplandsberegningerne?
- Er der anvendt andre parameterverdier, f.eks. for porøsiteter?

Ved uoverensstemmelser aftales omfanget af genberegninger med Miljøstyrelsen.

### 3.6.3 3D grundvandsdannende områder

Modellen og resultaterne for de 3D grundvandsdannende områder kvalitetssikres ved gennemgang af nedenstående relevante punkter for hhv. 3D grundvandsdannelse til borer og magasiner.

3D grundvandsdannelse til borer:

- Områder med grundvandsdannelse til borerne sammenlignes med de tidligere beregnede grundvandsdannende partikler samt de administrative indvindingsoplande, afsnit 3.6.2.
- Sammenligning af beregnede minimums- og middeltransporttider til borer med aldersvurderinger ud fra grundvandskemi, som beskrevet i afsnit 2.2, hvis ikke dette er gjort for modellen med aktuel indvinding.
- Efter aftale med Miljøstyrelsen kan det vurderes, at det skal undersøges om der er forholdsmæssig sammenhæng mellem størrelsen af 3D grundvandsdannelse til borerne og indvindingsmængden fra borer. Evt. foretages en opgørelse af vandbalancen ved opsummering af 3D grundvandsdannelse på model- eller anlægsniveau og sammenligne med indvindingen.
- Undersøge om celler med meget kort transporttid til borer skyldes terrænnære magasiner, eller strukturen i modellen helt terrænnært.
- Hvis IOL er bestemt ved baglæns partikelbaneberegning kan partiklernes placering i borerne give uoverensstemmelser mellem IOL og 3D grundvandsdannende oplande beregnet til SGO.

3D grundvandsdannelse til magasiner:

- Sammenligne om der er sammenhænge mellem størrelsen af 3D grundvandsdannelse til magasinerne og tykkelse af hhv. sand- og lerdæklag. Passer det f.eks., at der er stor grundvandsdannelse de steder, hvor dæklag er sand, og lille grundvandsdannelse de steder, hvor dæklag er ler?
- Undersøge om der findes områder med 3D grundvandsdannelse til magasinerne, hvor der forventes lav eller ingen 3D grundvandsdannelse, f.eks. langs vandløb, søer eller vådområder eller øvrige områder med forventet opadrettet gradient.
- Undersøge om transporttider til dybereliggende magasinlag generelt er længere end til overliggende magasinlag.
- Undersøge om celler med meget kort transporttid til magasiner skyldes terrænnære magasiner, eller evt. udfordringer i modellen helt terrænnært.

Ved uoverensstemmelser eller uforklarlige resultater aftales omfanget af evt. genberegninger eller modelopdateringer af referencemodellen med Miljøstyrelsen. Analysen kan ligeledes give en mulighed for at have ekstra fokus på områder/parametre i følsomhedsanalysen og usikkerhedsberegningerne. F.eks. ved at variere K-værdier indenfor et større spænd, eller medtage parametre, der ellers ikke er følsomme, dvs. ikke kan estimeres ud fra kalibreringsdatasættet.

## 4. Stokastiske modelopsætninger

Nærværende afsnit beskriver de overordnede metoder for opsætning af modelrealisationer for at kvantificere usikkerheden på de beregnede 3D grundvandsdannende områder. Modelrealisationerne kan desuden anvendes til at kvantificere usikkerheden på indvindingsoplandenes udstrækning. Der udføres stokastiske beregninger, hvor værdierne for udvalgte modelparametre varieres inden for en realistisk spændvidde, for at beskrive usikkerheden på modelresultaterne, som følge af usikkerheden på parameterværdierne.

Det er vigtigt, at der i hver enkelt opgave foretages en faglig vurdering af hvilke parametre, der er relevante og passende at inkludere i usikkerhedsanalysen ud fra de lokale forhold.

Følgende punkter beskriver kort den stokastiske modellering for en færdig referencemodel:

1. Beregn parameterfølsomhederne og udvælg parametre
2. Generer parametersæt
3. Foretag beregninger med alle parametersæt og evaluer objektivfunktionen
4. Bestem udvælgelseskriterier for stokastiske modeller
  - 5a. Forkast de parametersæt, der ikke overholder grænseværdien
  - 5b. Evt. rekalkibrering af parametersæt, der ikke overholder grænseværdien
6. Udfør partikelbaneberegning på de udvalgte modeller

### 4.1 Udvalgelse af parametre

Der findes forskellige tilgange til udvælgelse af de parametre, der skal indgå som variable i de stokastiske beregninger. Udgangspunktet er at inkludere så mange parametre som muligt indenfor opgavens rammer, så parameterusikkerhederne ikke underestimeres. Generelt vil et større antal parametre bedre beskrive usikkerhederne i modellen, men i praksis kan det være nødvendigt at begrænse antallet af parametre pga. ressourcebegrænsninger (hardware eller modellens type, størrelse, opbygning osv.). Erfaringer viser, at nogle parametre har væsentlig mindre indflydelse på modelresultaterne end andre, hvorfor disse kan udelukkes.

Parametre kan udvælgelse på baggrund af:

- Fra modelopsætningen og kalibreringen, hvor de mest følsomme parametre blev identificeret og anvendt som kalibreringsparametre
- Ny følsomhedsanalyse for referencemodellen
- Erfaring med parametre af betydning for beregningerne fra øvrige modeller
- Ovenstående kan suppleres med parametre identificeret under kvalitetssikringen af modellen, afsnit 3.6.

#### 4.1.1 Følsomhedsanalyse

Før de stokastiske beregninger gennemføres, kan der udføres en følsomhedsanalyse for at identificere de modelparametre, som objektivfunktionerne er særlig følsomme over for. I følsomhedsanalysen benyttes objektivfunktioner fra modelkalibreringen, der inddrager observationsdata, som f.eks. pejledata og vandføringsmålinger. Evalueringsperioden af følsomhedsanalysen er så vidt muligt den samme periode, som der er udført oplandsberegninger for med tillægsmodellen.

Under antagelse af, at de parametre som påvirker objektivfunktionen mest også har størst betydning for partikelbanesimuleringen, kan følsomhedsanalysen anvendes til at udvælge

parametrene, som skal indgå i den stokastiske beregning. Resultaterne fra en følsomhedsanalyse udført forud for modelkalibreringen kan anvendes fremfor at lave en ny.

I forhold til stokastiske beregninger kan følsomhedsanalysen ligeledes anvendes til bestemmelse af kovariansen og derved standardafvigelsen for parameterverdierne, der kan anvendes til generering af parametersæt.

Som udgangspunkt bør så mange relevante parametre som muligt indgå i analysen. Men for at optimere ressourceforbruget til følsomhedsanalysen kan der udvælges de modelparametre, der af erfaring har størst indflydelse på modelresultaterne. Følgende parametre anbefales, som minimum, at skulle inddrages i følsomhedsanalysen for en model:

- Horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevner i alle geologiske enheder
- Dræparametre
- Lækagekoefficient for vandløb og søer

For modeller, der beskriver terrænnære forhold og fordampning, kan det være relevant at medtage bl.a. roddybder for de mest dominerende afgrøder, befæstelsesgrad mv., mens eksempelvis den specifikke ydelse og magasintallet (for dynamiske modeller) ofte kan udelades fra følsomhedsanalysen, da de erfaringsmæssigt ikke er følsomme. Et fravalg af parametre bør altid baseres på en konkret vurdering, ideelt baseret på erfaringer fra kalibreringsprocessen.

Parametrenes følsomhed vurderes relativt i forhold til observationsdata, og derfor vil parametervalg baseret på følsomheder blive afhængig af placering af observationsdata. Parametre i datatynde områder vil sjældent optræde som følsomme, selvom de lokalt kan have en tilsvarende påvirkning på trykniveauet, som parametre i datatunge områder. Det kan derfor være relevant at lade de mindre følsomme parametre, f.eks. i zoneringer for tilsvarende modellag, være afhængige af de udvalgte følsomme parametre.

I Bilag 3 og Bilag 4 er givet eksempler for hhv. modelkoderne MODFLOW og MIKE SHE.

#### **4.1.2 Parametervalg fra erfaringer**

Da de samme modelparametre oftest viser sig at være følsomme på tværs af hydrologiske modeller, kan udvælgelsen af parametre til de stokastiske beregninger foretages på baggrund af denne erfaring. Parametrene vælges blandt de i modellen mest udbredte fra de ovenstående listede parametre. Her kan ligeledes inddrages parametre, der er identificeret under kvalitetssikringen af modellen, afsnit 3.6.

Denne metode er særlig anvendelig i tilfælde af at modellen har meget få parametre, eller at modellen tidligere har vist at være ufølsom overfor de fleste parametre. Vurderingen heraf skal altid foretages i samarbejde med Miljøstyrelsen.

### **4.2 Parametersæt til stokastiske beregninger**

Der findes forskellige metoder til at danne parametersæt til de stokastiske beregninger. Nedenfor er beskrevet to metoder, "Nearly Orthogonal Latin Hypercubes" og "Null-space Monte Carlo", som samler parametersæt med udgangspunkt i parameterverdierne i referencemodellen. Ved nye modeller kan parametersæt ligeledes udvælges fra kalibreringsprocessen, hvor ofte et stort antal parametersæt testes. Andre metoder kan anvendes efter aftale med Miljøstyrelsen.

#### **4.2.1 Nearly Orthogonal Latin Hypercubes**

*Nearly Orthogonal Latin Hypercubes* (NOLH) kan anvendes til sampling af parameterverdier for at generere unikke parametersæt til de stokastiske beregninger. Hertil kan f.eks. regnearket fra /12/ anvendes. Parametersættene bliver her dannet ved at sample værdierne for de

udvalgte modelparametre inden for givne intervaller. I ortogonal sampling opdeles intervallerne i lige sandsynlige underintervaller. I regnearket antages dog en ligelig fordeling af parameter-værdier i hele parameterintervallet og ikke en normalfordeling omkring initialværdien.

Regnearket er sat op således, at der minimum genereres 33 parametersæt for op til 11 parametre, 65 parametersæt for 12-16 parametre, 129 parametersæt for 17-22 parametre osv., med mulighed for at generere flere parametersæt om ønsket.

Parameterintervaller, der skal benyttes til samplingen af parametersæt, kan f.eks. bestemmes ud fra standardafvigelsen for parametrene fra følsomhedsanalysen, eller ved anvendelse af erfaringstal.

Parameterintervallerne,  $[P_{\text{nedre}}, P_{\text{øvre}}]$ , kan bestemmes ud fra initialværdien i referencemodellen  $P_{\text{ref}}$ , standardafvigelsen,  $\sigma$ , og faktoren,  $n_\alpha$ , der skal multipliceres med standardafvigelsen for konfidensintervallet,  $\alpha$ .  $n_\alpha = 2$  for  $\alpha = 95\%$  konfidensinterval, dvs. parameter-værdierne varierer inden for intervallet  $\pm 2 \cdot \text{standardafvigelserne}$ , og  $n_\alpha = 1$  for  $\alpha = 68\%$  konfidensinterval, dvs. parameter-værdierne varierer inden for intervallet  $\pm 1 \cdot \text{standardafvigelse}$ .

Parameterintervallerne bliver herved:

$$[P_{\text{nedre}}, P_{\text{øvre}}] = [P_{\text{ref}} - n_\alpha \cdot \sigma, P_{\text{ref}} + n_\alpha \cdot \sigma]$$

Og for log-transformerede parametre, som typisk er de hydrauliske ledningsevner og tidskonstanter, der kan variere inden for flere størrelsesordner, er standardafvigelse ligeledes log-transformerede, og parameterintervallerne beregnes ved:

$$[\log(P_{\text{nedre}}), \log(P_{\text{øvre}})] = [\log(P_{\text{ref}}) - n_\alpha \cdot \sigma, \log(P_{\text{ref}}) + n_\alpha \cdot \sigma]$$

Som udgangspunkt benyttes 95% konfidensintervallet til at beregne parameterintervaller, men hvis parameterintervallerne bliver for brede, kan det være relevant at anvende et konfidensinterval på 68% for at opnå realistiske parameter-værdier. Hvis et symmetrisk parameterinterval omkring den kaliberede parameter-værdi ikke er realistisk, kan den øvre eller nedre værdi tilpasses, så det reflekterer et realistisk spænd.

Foretages parameterudvælgelsen fra en tidligere følsomhedsanalyse for modellen eller via generelle erfaringer med hydrologiske modeller, kan parameterintervallerne sættes relativt brede - eksempelvis  $\frac{1}{2}$  - 1 dekade omkring parameter-værdien i referencemodellen. Der skal herved ligeledes anvendes et relativt stor antal parametersæt (f.eks. 100-200 sæt), hvor parameter-værdierne kan samples med NOLH. Fra de mange modelrealisationer foretages en evaluering af resultaterne med udvælgelse af modeller med parametersæt, der opfylder kriterierne for objektivfunktionen beskrevet i afsnit 4.2.3. Denne metode kan ligeledes anvendes, hvis parameterintervallerne bestemt ved standardafvigelsen bliver så smalle, at de ikke beskriver usikkerheden og må forkastes.

Anvendelse af brede intervaller for parameter-værdierne kan medføre frasortering af en stor del modelrealisationer ud fra kriterierne beskrevet i afsnit 4.2.3, og i dette tilfælde anbefales det at anvende et så tilpas antal parametersæt, at der kan udvælges minimum 30-50 modelrealisationer til usikkerhedsberegningerne.

NOLH-metoden anbefales derfor ved modeller, som har lange beregningstider og er begrænsede til relativt få stokastiske realisationer.

- Erfaringer, både generelle og fra den specifikke model, om følsomme parametre kan anvendes til parametervalg og bestemmelse af parameterintervaller.

- Overstiger antallet af parametre, der ønskes varieret i usikkerhedsberegningerne, antallet af variable i regnearket, kan parametre bestående af f.eks. hydrauliske ledningsevner fra samme modellag kobles sammen.

#### 4.2.2 Null-space Monte Carlo

*Null Space Monte Carlo* (NSMC) skaber flere versioner af referencemodellen ved at generere parametersæt baseret på kovariansmatricen, som overholder korrelationen i de estimerede parametre.

Metoden er heri beskrevet overordnet, men alle beregningsskridt kan gennemføres gennem software PEST/PEST++ og er dokumenteret i /13/, /14/ og /15/.

På baggrund af følsomhedsanalysen er der bestemt en posterior kovariansmatrice,  $\mathbf{C}'(\mathbf{k})$ , til parametervektoren,  $\mathbf{k}$ , ved anvendelse af følgende approksimation:

$$\mathbf{C}'(\mathbf{k}) = \mathbf{C}(\mathbf{k}) - \mathbf{C}(\mathbf{k})\mathbf{Z}^T[\mathbf{Z}\mathbf{C}(\mathbf{k})\mathbf{Z}^T + \mathbf{C}(\boldsymbol{\varepsilon})]^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{C}(\mathbf{k})$$

Hvor  $\mathbf{C}(\mathbf{k})$  er prior kovariansmatricen bestemt på baggrund af de vurderede grænser for parameterverdierne i kalibreringsopsætningen.  $\mathbf{C}(\boldsymbol{\varepsilon})$  er en diagonal kovariansmatrice, hvor diagonalelementerne er de estimerede usikkerheder på observationsdata, og  $\mathbf{Z}$  er følsomhedsmatricen for det optimerede kalibreringsproblem.

På baggrund af  $\mathbf{C}'(\mathbf{k})$  genereres der flere parametersæt, som overholder korrelationen i de estimerede parametre. Dette sker ved anvendelse af en Gaussfordeling. Ved hjælp af null-space projektion kan differencen imellem de stokastisk genererede parametre og det kalibrerede datasæt bestemmes som:

$$(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{est})' = \mathbf{V}_2\mathbf{V}_2^t(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{est})$$

Hvor  $\mathbf{V}_2$  bestemmes på baggrund af  $\mathbf{Z}\mathbf{C}(\mathbf{k})\mathbf{Z}^T$ , som er trunkeret i forhold til de laveste egenværdier,  $\mathbf{p}$  er parametersættet bestemt i kalibreringen, og  $\mathbf{p}_{est}$  er et af de stokastisk genererede parametersæt. Det null-space projicerede parametersæt bestemmes som  $\mathbf{p}$  plus  $(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{est})'$ . Hvis modellen er lineær, vil dette parametersæt resultere i den samme objektivfunktion som referencemodellen. Da grundvandsmodeller ofte ikke er lineære, indarbejdes alle null-space projicerede parametersæt i modellen, og der foretages en vurdering omkring hvilke realisationer, der er acceptable.

Følgende punkter anbefales ved brugen af NSMC at metoden

- PEST eller PEST++ benyttes til at udføre beregningerne.
- Modelkalibrering og usikkerhedsanalyse understøttes af matematisk regularisering i form af singular value decomposition.
- At alle parametrene fra kalibreringen benyttes til at genere de stokastiske realisationer.
- Generer som udgangspunkt 200 parametersæt, så der er en tilstrækkelig mængde tilbage efter evt. frasortering.

#### 4.2.3 Parametersæt fra kalibreringen

Ved en modelkalibrering testes et stort antal parametersæt som optimeres ud fra objektivfunktionen. Ofte benyttes flere objektivfunktioner, der vægtes til én samlet objektivfunktion. Efter endt kalibrering udvælges ét parametersæt blandt de testede parametersæt, der vurderes bedst at opfylde objektivfunktionerne. Der findes dog en lang række parametersæt, der ved forskellig vægtning af objektivfunktionerne kunne udvælges som den optimale model. Disse modeller ligger på/nær paretofronten. Der vil derfor kunne findes forskellige parametersæt,

som opfylder kriteriet for objektivfunktionerne, beskrevet i afsnit 4.2.3, som kan anvendes til usikkerhedsberegningerne. Parametervariationen vil ofte være større ved denne metode end for de ovenstående metoder, hvor der samples omkring parameterværdier i referencemodellen, og kan derfor resultere i en større vurderet usikkerhed på modellens resultater.

Såfremt der vurderes fordelagtigt at anvende en anden metode end NOLH eller Null-space Monte Carlo, bør der være gode argumenter herfor og dette skal aftales med Miljøstyrelsen.

### 4.3 Evaluering af stokastiske modeller

Grænseværdien for objektivfunktionen,  $\Theta_0$ , for hvilke parameterværdisæt der accepteres, kan estimeres med følgende formel (formel 13.2.6 i /15/):

$$\theta_0 = \theta_{min} \left[ \frac{m+1}{n-m} F_{\alpha}(m+1, n-m) + 1 \right]$$

hvor  $\Theta_{min}$ , er den endelige objektivfunktion fra referencemodellen, som blev fundet i kalibreringen,  $m$  er antallet af parametre,  $n$  er antallet af modelobservationer og  $F_{\alpha}$  er den inverse sandsynlighedsfordeling til sandsynligheden  $\alpha$ .

Hvis antallet af modelparametre,  $m$ , er lig med eller overstiger antallet af observationer,  $n$ , vil ovenstående formel ikke kunne benyttes. Grænseværdien vil i disse tilfælde være subjektiv baseret på erfaringer gjort under modellens opbygning og efterfølgende parameterkalibrering. Grænseværdien for objektivfunktionen kan enten være den absolutte værdi,  $\Theta_0$ , bestemt med formelen ovenfor, eller en relativ størrelse, hvor der frasorteres en procentdel af modellerne med dårligst tilpasning.

Udover vurdering af objektivfunktionen er det også et krav, at de stokastiske modelrealisationer konvergerer, vandbalancefejlen er mindre end 1%, samt at indvindingsboringer ikke løber tørre/ikke kan indvinde den påtrykte vandmængde. De parameterværdisæt, hvor modellen ikke overholder grænseværdien for objektivfunktionen/massebalance eller kravet om konvergens, skal frasorteres.

Efter frasortering benyttes de resterende parametersæt til partikelbaneberegning og bestemmelse af 3D grundvandsdannende områder og evt. indvindingsoplande.

### 4.4 Andre variable til usikkerhedsberegninger

I ovenstående beskrivelse af usikkerhedsvurderingen med de stokastiske beregninger er det primært de forskellige hydrauliske parametre, der typisk indgår i en kalibrering, som varieres. Der kan dog være specielle forhold i de enkelte modeller, som kan have betydning for de 3D grundvandsdannende områder og være relevante at medtage i robusthedsvurdering heraf. Det skal derfor vurderes, om det kan være relevant at medtage andre parametre/forhold, f.eks. på baggrund af kvalitetssikringen af referencemodellen, som beskrevet i afsnit 3.6.

Ved evt. supplerede usikkerhedsvurderinger, skal det vurderes om disse parametre/input til modellen kan indarbejdes som en yderlig parameter i opsætningen af de stokastiske parametersæt, eller om de skal testes separat, hvor det i så faldt skal overvejes, hvordan disse resultater inddrages i opsummeringen af de samlede usikkerheder.

Nedenfor er givet eksempler på input og parametre til modellen, som kan medtages i usikkerhedsvurderingerne.

#### 4.4.1 Klimainput

Påvirkningen på modelresultaterne af forskellige fremtidige klimascenarier kan undersøges, hvis dette findes relevant. Det anbefales at anvende klimascenarierne for "begrænsede krav"

og "fjern fremtid" (2071-2100), dvs. RCP4.5 udledningsscenarioet, som også beskrevet i /16/. I dokumentationsrapporten for HIP-modellen er de fem anvendte RCP4.5 scenarier listet (c03ff, c07ff, c11ff, c16ff og c17ff i Tabel 19 i /17/). Tidsserie af fremtid klimadata (nedbør, fordampning og temperatur) samt beregnet infiltration på 500 m grid for de fem klimascenarier er tilgængeligt for download på [hipdata.dk](http://hipdata.dk).

Ved inddragelse af usikkerheden på det fremtidige klima i modelberegningerne skal det overvejes om fremtidige havvandsstigninger potentielt kan påvirke de 3D grundvandsdannede oplande, f.eks. ved kystnære indvindingsboringer. Inddrages havvandsstigninger i usikkerhedsberegningerne, skal der være fokus på, om der skal foretages ændringer i f.eks. drænforhold og vandløbenes udløbskote ved kysten.

Analysen af klimadata medtages i usikkerhedsberegningerne viser generelt, at de grundvandsdannende oplande påvirkes minimalt /5/, /19/, /20/, /21/. I tilfælde hvor den fremtidige nedbør generelt øges, sker en minimal reduktion i arealet af de grundvandsdannende oplande til boringerne, og omvendt hvis nedbøren reduceres, øges arealet af de grundvandsdannende oplande minimalt. Derfor anbefales det generelt ikke at medtage klimascenarier ifm. de stokastiske modelopsætninger.

#### 4.4.2 Porøsiteter

Porøsiteterne i modellen har direkte indflydelse på transporttiden fra terræn til boringer og magasin. Porøsiteterne har derfor betydning for de grundvandsdannende områder, når de afskæres ud fra transporttider.

I de tilfælde, hvor der er under kvalitetssikringen af modellen viser sig at være uoverensstemmelser mellem simulerede transporttider og vurderede grundvandsaldre fra grundvandskemien, beskrevet i hhv. afsnit 2.2 og 3.6.3, kan det være relevant at medtage porøsiteterne i usikkerhedsvurderingerne eller at ændre porøsiteterne i modellen. Hvis transporttiderne generelt eller for delområder i modellen simuleres for lave, kan porøsiteterne for alle eller udvalgte geologiske enheder varieres fra middelværdien og op til maks-værdien, TABEL 1, og tilsvarende, hvis transporttiderne simuleres for høje kan porøsiteterne varieres fra middelværdien og ned til min-værdien, TABEL 1,

Såfremt det vurderes at porøsiteterne skal medtages i usikkerhedsbetragtningerne (alternativ til at ændre dem direkte i modellen) kan dette ske ved enten at:

- foretage enkelte beregninger med referencemodellen med alternative værdier for porøsiteter for at vurdere porøsiteternes påvirkning af transporttiden indenfor de 3D grundvandsdannende oplande, og dermed SGO, uafhængigt af de øvrige parametre eller
- fuldt inddrage porøsiteterne i de stokastiske beregningerne, hvor hvert stokastiske parametersæt kombineres med stokastiske værdier for porøsiteterne. Parametersæt for porøsiteterne kan f.eks. bestemmes ved regnearket beskrevet i afsnit 4.2.1. Denne metode anbefales for at give usikkerhedsvurderingen af porøsiteterne samme vægt som de øvrige parametre.

Realistiske intervaller af porøsiteterne for de geologiske lag er listet i TABEL 1. Porøsiteten forventes generelt at have størst betydning for beregninger af 3D grundvandsdannelse til boringer filtersat i kalk, da det realistiske parameterspænd for kalken forventes at være større end for sand og ler.

**TABEL 1.** Anbefalede porøsiteter i usikkerhedsberegningerne. Referenceværdier er hentet fra /8/, og intervallerne fra Geovejledningen /10/ modificeret jf. /8/.

| Geologisk lag                         | Effektiv porøsitet, % |     |     |
|---------------------------------------|-----------------------|-----|-----|
|                                       | Reference             | Min | Max |
| Ler                                   | 40                    | 30  | 60  |
| Moræneler                             | 25                    | 10  | 30  |
| Silt                                  | 40                    | 35  | 50  |
| Sand                                  | 30                    | 25  | 40  |
| Grus                                  | 27                    | 20  | 35  |
| Sand og grus (usorteret)              | 25                    | 15  | 35  |
| Kalk.- ikke opsprækket (matrix)       | 30                    | 15  | 40  |
| Kalk.- opsprækket (matrix + sprækker) | 20                    | 11  | 30  |
| Sandsten                              | 15                    | 5   | 30  |

#### 4.4.3 Andre forhold

Hvis der under opsætning, kalibrering eller kvalitetssikring af modellen viser sig at være særlige lokale forhold, der kan have betydning for IOL og SGO, kan det være relevante at inddrages disse i usikkerhedsvurderingerne. Dette kan være alternative indvindingsforhold, randbetingelser, gridopløsning eller alternativ tolkning af geologien.

#### 4.5 Processering af stokastiske realisationer til SGO

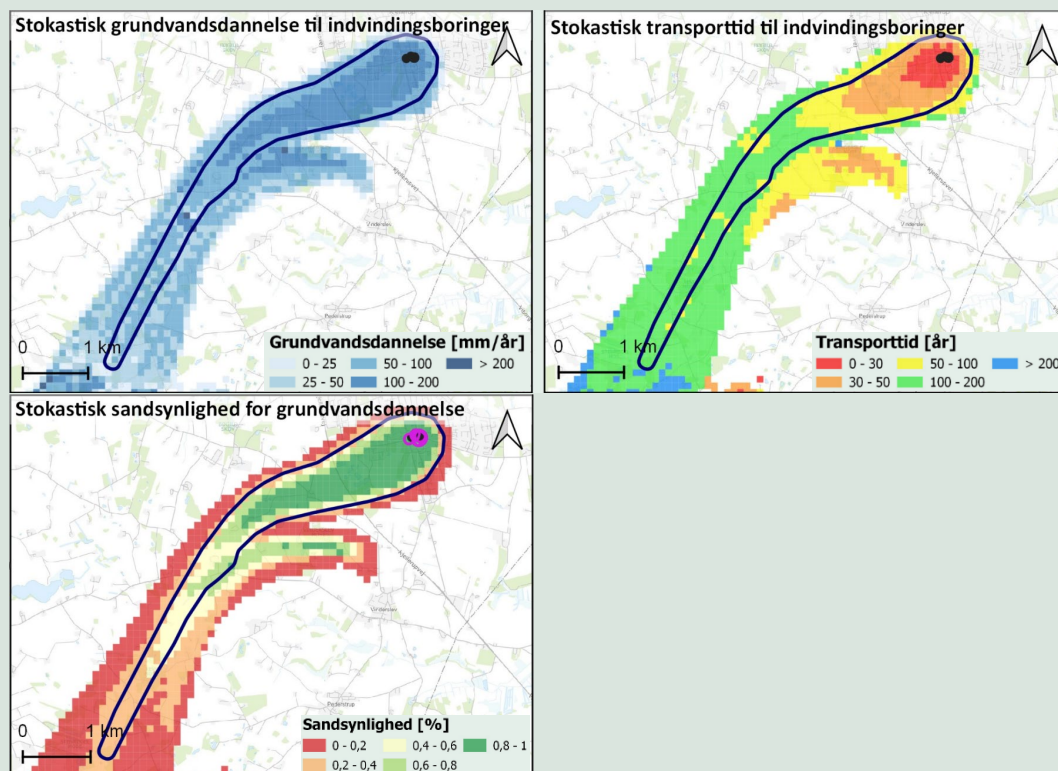
Resultater fra de udvalgte stokastiske realisationer anvendes i processeringsværktøjet under fanen *Multiple models*, hvor der for hver model realisation genereres en fil med grundvandsdannelse til hvert magasinlag og en fil med grundvandsdannelse til indvindingsboringer, se afsnit 2.1 og Bilag 1.

Hvis der foretages en udvælgelse blandt de stokastiske realisationer, f.eks. som beskrevet i afsnit 4.3, hvor urealistiske model realisationer frasorteres, foretages en opsummering af resultaterne under fanen *Summarization* i processeringsværktøjet, hvor der peges på de processerede data fra de udvalgte model realisationer.

Ud fra outputtet fra processeringsværktøjet optegnes de grundvandsdannende oplande for opsummerede resultater fra de udvalgte stokastiske realisationer tematiseret efter:

- gennemsnitlig minimums transporttider til boringer og magasiner
- gennemsnitlig grundvandsdannelse til boringer og magasiner
- sandsynlighed for at der sker grundvandsdannelse

FIGUR 4 viser et eksempel på tematisering af gennemsnitlig grundvandsdannelse og transporttider samt sandsynligheder for de grundvandsdannende oplande.



**FIGUR 4.** Eksempler på tematisering af den gennemsnitlige grundvandsdannelse og gennemsnitlige minimumstransporttider til boringer, samt sandsynligheden for grundvandsdannende opland fra stokastiske beregninger fra /6/, vist med det administrative indvindingsopland.

#### 4.6 Kvalitetssikring af stokastiske realisationer

Der foretages en kvalitetssikring af de stokastiske beregninger. Dette indbefatter bl.a.:

- vurdering af usikkerheden på de 3D grundvandsdannende områder bestemt ved sandsynligheden fra de stokastiske realisationer. Er usikkerheden f.eks. meget stor i et område, kan det tyde på, at parameterverdierne enten er meget usikre eller er varieret for meget eller vice versa.
- mulighed for at gennemgå resultaterne for de stokastiske beregninger enkeltvis via kort og histogrammer fra processeringsværktøjet, f.eks. for at undersøge variationen i de grundvandsdannende områder til de beregninger, hvor en given parameter varieres mest.

## 5. Afslutning/opsummering

### 5.1 Anbefalet metode

Ovenstående afsnit udgør den tekniske beskrivelse af modelopsætning og usikkerhedsberegninger til de 3D grundvandsdannende områder, der danner grundlag for SGO. Der foretages løbende vurderinger af hvilke forhold, der skal inddrages i beregningerne, og i dette afsnit opsummeres den anbefalede metode. Der kan være argumenter for i specielle tilfælde at foretage andre valg for modelopsætningen og beregningerne. Disse ændringer skal dog altid aftales med og godkendes af Miljøstyrelsen.

#### 5.1.1 Modelopsætning

Opsætning, gennemførelse og kvalitetssikring af strømnings- og partikelbaneberegninger for referencemodellen følger beskrivelsen i kapitel 3, med:

- Opdatering af boringsplaceringer, indvindingsstilladelser, porøsitet for relevante materialer/hydrostratigrafiske enheder mv., afsnit 3.2.
- Indledende beregning af indvindingsoplande og sammenlign med de eksisterende IOL, afsnit 3.3.
- Partikelbaneberegninger til 3D grundvandsdannende områder, registrering af partiklerne i boringer og magasiner, afsnit 3.4:
  - Som udgangspunkt anvendes 49 (7x7) partikler per hektar, men antallet kan reduceres, f.eks. ved meget store modelområder. En test på et mindre område kan vise, om reduktion af partikelantallet giver sammenlignelige resultater.
  - Forward partikelbaneberegning køres som udgangspunkt i minimum 500 år for dynamiske modeller. For stationære modeller forventes det at disse køres til ende.
- Kvalitetssikring af modelberegningerne med bl.a. sammenligning af beregnede transporttider med grundvandskemien, grundvandsdannede oplande med IOL og indvindingsmængderne, tjek af tykkelsen af den umættede zone osv. jf. afsnit 3.6.

#### 5.1.2 Stokastisk modellering

##### Parameterudvælgelse

Usikkerheden på beregning af de grundvandsdannende områder foretages ved stokastisk modellering, hvor følgende modelinput inddrages:

- De mest betydende parametre for modelusikkerheden bestemmes som udgangspunkt vha. en følsomhedsanalyse kombineret med generel modelerfaring, og der medtages så mange parametre, som vurderes muligt. Evt. kan parametre kobles under de stokastiske beregninger, således at de varieres med samme faktor. Dette kan f.eks. være hydrauliske ledningsevner for zoner i sammen modellen. Se afsnit 4.1.
- Hvorvidt porøsiteter inkluderes i de stokastiske beregninger, baseres på om der findes uoverensstemmelser mellem beregnede transporttider og grundvandskemien, afsnit 4.4.3.
- Usikkerheder på modelinput såsom fremtidigt klima, indvindingsmængder, modelopløsning og hydrostratigrafi mv. skal i udgangspunktet ikke inddrages i den stokastiske modellering, med mindre særlige forhold i modellen medfører, at disse kan være relevante. De kan inddrages, hvis det vurderes under aftale med Miljøstyrelsen, at der i området er særlige forhold, som gør det nødvendigt.

##### Parametersæt

Til generering af parametersæt til den stokastiske analyse anbefales det at benytte en af følgende metoder:

- NOLH til modeller som har lange beregningstider og derfor er begrænset til få stokastiske realisationer, afsnit 4.2.1. I NOLH kan parameterintervallet enten fastlægges ud fra standardafvigelser eller som  $\frac{1}{2}$  - 1 dekade omkring parameterværdien i referencemodellen med efterfølgende udvælgelse af parametersæt, der opfylder kriterier til objektivfunktionen.
- NSMC til modeller som har mange justerbare parametre, afsnit (4.2.2). Parameterintervaller bestemmes ud fra den beregnede kovarians, og afgrænses af de værdier som blev brugt i kalibreringen.

Hvis det i en opgave vurderes, at der er andre metoder til generering af parametersæt til stokastisk modellering, som er mere egnede end de anbefalede metoder, kan disse benyttes efter aftale med Miljøstyrelsen.

Partikelbaneberegningen som er udført på referencemodellen gentages på de udvalgte stokastiske realisationer. Dog kan de stokastiske beregninger af grundvandsdannende områder til magasiner undlades for MODFLOW modeller, idet der skal foretages en beregning pr. magasinlag, som medfører store datamængder.

## 5.2 Leverancer til SGO

Arbejdet med de 3D grundvandsdannende områder afrapporteres i en separat rapport, hvis opgaven løses efter grundvandsmodellen er afsluttet og afrapporteret (genberegningsprojekt jf. /9/). Ved nye kortlægningsopgaver med grundvandsmodeller, der ikke er afsluttet, løses opgaven med de grundvandsdannende områder som en del af den hydrologiske modelleringsopgave, og kan derfor passende afrapporteres i et kapitel i den samlede rapport for den hydrologiske model.

Afreporteringen skal dokumentere grundlaget for de gennemførte stokastiske beregninger. Det forventes, at parameterlisten for de stokastiske modeller indgår, herunder hvilke parametre der er varieret, deres variationsintervaller samt de anvendte parametersæt. Hvis porøsiteter er ændret eller indgår som variable i de stokastiske beregninger, skal de valgte porøsiteter beskrives og begrundes. Endvidere skal der redegøres for modellens performance i forhold til den kemiske validering af de beregnede transporttider, herunder hvordan den valgte porøsitet påvirker overensstemmelsen mellem modelresultater og den kemiske validering.

Afreporteringen skal desuden indeholde relevante figurer, som dokumenterer resultaterne af beregningerne. Omfanget og udvælgelsen af figurer aftales i samarbejde med Miljøstyrelsen. Der kan være tilfælde, hvor det ikke er hensigtsmæssigt at vise 3D grundvandsdannelse for samtlige magasiner. I sådanne tilfælde kan det eksempelvis aftales alene at præsentere resultater for de primære magasiner i området eller et andet repræsentativt udsnit, så rapporteringen bliver fagligt dækkende uden at blive unødigt omfattende.

Fra referencemodellen leveres følgende filer:

- Partikelfil til boringer med bl.a. startposition, slutposition, transporttid og boringsID
- Partikelfiler til magasiner med bl.a. startposition, slutposition og transporttid for boringer
- Boringsliste med tilhørende kolonner beskrevet i /11/
- Resultatfiler fra processeringsværktøjet
- Vektorfil med indvindingsoplande og nødvendige attributter jf. /11/
- Tykkelseskort af umættet zone
- Evt. udbredelsesfiler for magasinerne

Fra de stokastiske kørsler leveres følgende filer:

- Resultatfiler fra processeringsværktøjet for alle de udvalgte modelrealisationer
- Opsummering fra processeringsværktøjet over de udvalgte modelrealisationer
- Fil (eksempelvis tekstfil, excel-fil eller lignende) med parametersæt for de udvalgte modelrealisationer

Ud fra de leverede filer udarbejder Miljøstyrelsen kortmateriale og SGO-afgrænsning til hvert vandværk.

## 6. Referencer

- /1/ Miljø- og Ligestillingsministeriet (2026). Analyse af reguleringsmuligheder for beskyttelse af drikkevandet. Sårbare Grundvandsdannende områder. [Analyse af reguleringsmuligheder for beskyttelse af drikkevandet. Sårbare Grundvandsdannende områder.](#)
- /2/ Miljøstyrelsen (2024). Beregning af 3D grundvandsdannelse med MIKE SHE. Pilotprojekt Fyn: Sårbare grundvandsdannende områder. Udarbejdet af Rambøll. [Beregning af 3D grundvandsdannelse med MIKE SHE. Pilotprojekt Fyn: Sårbare grundvandsdannende områder.](#)
- /3/ Miljøstyrelsen (2024). Stokastiske partikelbaneberegninger. Sårbare grundvandsdannende områder. Udarbejdet af COWI og GEO. [Stokastiske partikelbaneberegninger. Sårbare grundvandsdannende områder.](#)
- /4/ Miljøstyrelsen (2024). Mølleå rapport. Udarbejdet af Rambøll.
- /5/ Miljøstyrelsen (2025). Lolland SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder. Udarbejdet af NIRAS. [Lolland SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder. Udarbejdet af NIRAS](#)
- /6/ Miljøstyrelsen (2025). Silkeborg Nord - SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder. Udarbejdet af NIRAS. [Silkeborg Nord - SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder.](#)
- /7/ Miljøstyrelsen (2024). Kravspecifikation. Bilag 1. Miljøstyrelsens grundvandskortlægning i 2024-2028. [Kravspecifikation. Bilag 1. Miljøstyrelsens grundvandskortlægning i 2024-2028](#)
- /8/ Miljøstyrelsen (2024). Administrative retningslinjer for hydrologisk modellering og beregning af indvindingsoplande og grundvandsdannende partikler. MST Grundvand og drikkevand nr. 16. ISBN: 978-87-7038-634-0. [Administrative retningslinjer for hydrologisk modellering og beregning af indvindingsoplande og grundvandsdannende partikler](#)
- /9/ Miljøstyrelsen (2026). Vejledning til genbrug af modeller ved genberegning af IOL, BNBO og SGO. I UDCAST.
- /10/ GEUS (2017). Hydrologisk geovejledning. God praksis i hydrologisk modellering. Geovejledning 2017/1. <https://data.geus.dk/pure-pdf/Geovejledning%202017-1.pdf>
- /11/ Miljøstyrelsen (2025). Groundwater Modelling Processing Tool. Beskrivelse af processeringsværktøj til grundvandsdannende områder. <https://gitlab.com/mst-gko/groundwater-model-processing-tool-public/>
- /12/ Sanchez, S. M., and Upton, S. C. (2023). NOLHdesigns spreadsheet version 9. Available online via [Harvest NPS](#) and [NPS Software Downloads](#)

- /13/ Tonkin, M., and J. Doherty (2009), Calibration-constrained Monte Carlo analysis of highly parameterized models using subspace techniques, Water Resour. Res., 45, W00B10, doi:10.1029/2007WR006678.
- /14/ Tonkin, M., J. Doherty, and C. Moore (2007), Efficient nonlinear predictive error variance for highly parameterized models, Water Resour. Res., 43, W07429, doi:10.1029/2006WR005348.
- /15/ Doherty, J., 2025. Calibration and Uncertainty Analysis for Complex Environmental Models. Second Edition. Watermark Numerical Computing, Brisbane, Australia. ISBN:978-0-9943786-1-3
- /16/ DMI (2018). Vejledning i anvendelse af udledningsscenarier. [Vejledning i anvendelse af udledningsscenarier.](#)
- /17/ GEUS (2020). Udvikling af landsdækkende modelberegninger af terrænnære hydrologiske forhold i 100m grid ved anvendelse af DK-modellen: Dokumentationsrapport vedr. modelleverancer til Hydrologisk Informations- og Prognosesystem. [HIP4 Plus Dokumentationsrapport](#)
- /18/ Naturstyrelsen, 2014. Notat: Præcisering af anbefalinger i GeoVejledning 2 mht. afgrænsning af indvindings- og grundvandsdannende oplande. Oktober 2014.
- /19/ Miljøstyrelsen (2026). Slagelse SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder. Udarbejdet af Rambøll. I UDCAST
- /20/ Miljøstyrelsen (2026). Odsherred SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder. Udarbejdet af Rambøll. I UDCAST
- /21/ Miljøstyrelsen (2026). Orø SGO. Sårbare Grundvandsdannende Områder. I UDCAST

# Bilag 1. Beskrivelse af processeringsværktøj et til grundvandsdannende oplande

For at sikre en automatiseret og ensartet processing af modelresultaterne har Miljøstyrelsen udviklet et pythonbaseret processeringsværktøj, som anvender standard output fra MIKE SHE og MODFLOW/MODPATH.

Værktøjet er tilgængeligt til download på Miljøstyrelsens GitLab-side, /11/, hvor der medfølger en detaljeret teknisk beskrivelse af programmet, leverancekrav og inputs.

## Beskrivelse af værktøj

Detaljer om versionering herunder changelog for versioner findes i Readme-filen.

Værktøjet er opdelt i faner til processing af data fra hhv. en MIKE SHE model og en MODFLOW model, FIGUR 5. For begge modeltyper indeholder værktøjet tre moduler til håndtering af data:

- Single model: Processing af en enkelt model med standard outputfil af partikelbanekørsler for grundvandsdannelse til borer og magasiner og z-flux. For processing af grundvandsdannelse til borer skal der anvendes excel fil med borerens tilknytning til magasin.
- Multiple models: Processing af data fra flere modelrealisationer i batch med efterfølgende opsummering over alle modeller.
- Summarization: De processerede resultater fra alle eller udvalgte modelrealisationer opsummeres til en afsluttende fil.

Nedenfor ses brugerfladen fra værktøjet med felter til de forskellige filer, der skal peges på, og felter, der skal udfyldes, FIGUR 5.



**FIGUR 5.** Brugerflade til processeringsværktøjet til MIKE SHE (t.v.) og MODFLOW (t.h.).

## Beskrivelse af datafelter i outputfilerne

Output fra processeringsværktøjet er gridfiler med 3D grundvandsdannende områder, som indeholder grundvandsdannelse og transporttider på gridniveau pr. model samt en opsummering over alle modeller med statistik for transporttiderne. Disse filer indgår efterfølgende til at identificere SGO.

Til hver model, referencemodellen og de stokastiske modeller, dannes en fil for hvert magasin samt en fil for indvindingsboringerne, der indeholder følgende:

- Optælling af partikler pr. modelcelle, der registreres i magasinet/fjernes i indvindingsboringer (NoPT)
- Beregning af andelen af partikler ift. det initiale antal partikler pr. celle (PctPT).
- Beregning af 3D grundvandsdannelsen pr. celle, som andelen af partikler pr. celle ganget med den vertikale flux (GVD\_3D).
- Beregning af transporttider fra grundvandsspejlet til magasinet/boringer med en middel-, median, minimum- og maksimumværdi samt standardafvigelse for partiklerne inden for hver celle (TrvYr\_avg, TrvYr\_med, TrvYr\_min, TrvYr\_max og TrvYr\_std).

Filerne med opsummeringen over de stokastiske realisationer indeholder:

- Gennemsnit af antal partikler pr. modelcelle, der registreres i magasinet/fjernes i indvindingsboringer (NoPT)
- Gennemsnitlig 3D grundvandsdannelse pr. celle (GVD\_3D).
- Statistik for transporttider fra grundvandsspejlet til magasiner/boringer med en middel-, median, minimum- og maksimumværdi samt standardafvigelse for modellerne (TrvYr\_avg, TrvYr\_med, TrvYr\_min, TrvYr\_max og TrvYr\_std).

Sandsynlighed for at der sker grundvandsdannelse pr. celle i de stokastiske realisationer, angivet som andel af modeller med grundvandsdannelse i cellen (GVD\_3D\_prob)

I TABEL 2 ses datafelter i outputtet fra processeringsværktøjet, samt en forklaring på dem.

**TABEL 2.** Data attributter samt forklaringer. Tekst i kursiv er for aflevering af de stokastiske modelkørsler, dvs. 3D\_GVD\_prb eksisterer kun i filer fra opsummeringen af de stokastiske modelrealisationer

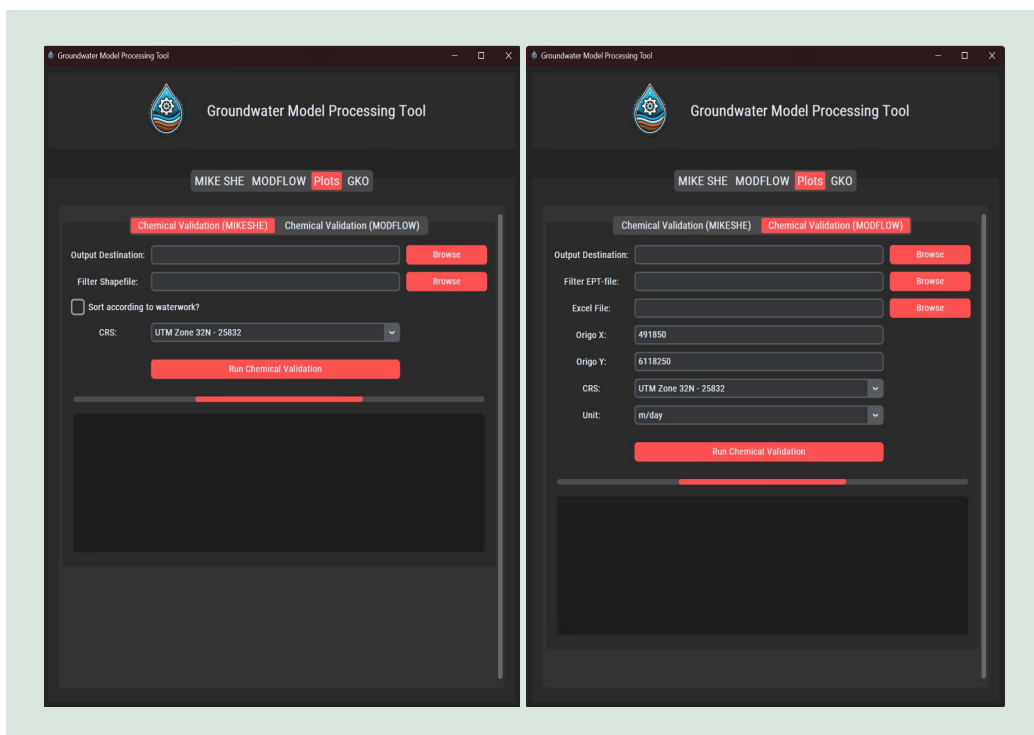
| Attributter       | Forklaring                                                                                                                                                                                                       |
|-------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Cell_ID           | Celle id                                                                                                                                                                                                         |
| zFlux             | Vertikale flux i cellen ( <i>median over alle modelrealisationer</i> )                                                                                                                                           |
| 3D_GVD            | Middelværdi af 3D grundvandsdannelse til magasin/filter ( <i>median over alle stokastiske modelrealisationer</i> )                                                                                               |
| NoPT              | Antallet af partikler anvendt i partikelbaneberegninger                                                                                                                                                          |
| PctPT/3D_GVD_prob | Procentdel af partikler, der når magasin/filter.<br>( <i>Sandsynlighed for at cellen har 3D grundvandsdannelse. Antallet af modeller med 3D grundvandsdannelse divideret med det samlede antal af modeller</i> ) |
| TrvYr_avg         | ( <i>Median af</i> ) Middeltransporttiden for partikler, der når magasin/filter                                                                                                                                  |
| TrvYr_med         | ( <i>Median af</i> ) Mediantransporttiden for partikler, der når magasin/filter                                                                                                                                  |
| TrvYr_min         | ( <i>Median af</i> ) Minimumstransporttiden for partikler, der når magasin/filter                                                                                                                                |
| TrvYr_max         | ( <i>Median af</i> ) Maksimumstransporttiden for partikler, der når magasin/filter                                                                                                                               |
| TrvYr_std         | ( <i>Median af</i> ) Standardafvigelsen af transporttiden for partikler, der når magasin/filter                                                                                                                  |

## Beskrivelse af leverance struktur

Dataleverancen skal følge dokumentation, som følger med værktøjet /11/.

## Bilag 2. Beskrivelse af processeringsværktøj et til kemisk validering og histogrammer

I Processeringsværktøjet beskrevet i Bilag 1, er der under fanen "Plots" implementeret mulighed for at lave histogrammer over beregnede transporttider samt udarbejde et Excel-ark til kemiske validering af transporttider. Afhængig af modelkoden (MIKESHE eller MODFLOW) er der to faner i Processeringsværktøjet til dette (se FIGUR 6.).



**FIGUR 6.** Brugerflade til kemisk validering i processeringsværktøjet for MIKE SHE (t.v.) og MODFLOW (t.h.).

For MIKESHE skal der specificeres:

- lokation, hvor resultaterne skal gemmes
- shapefil med resultaterne fra partikelbaneberegning til indvindingsboringerne
- Excel-fil med kolonnerne "WellName" og "PlantName", såfremt man tilvælger at sortere boringerne jf. vandværk

For MODFLOW skal der ligeså tilføjes

- lokation, hvor resultaterne skal gemmes
- EPT-fil med resultater fra partikelbaneberegningen til indvindingsboringerne.
- Excel-ark med kolonnerne "WellName" og "I", "J", "K" (for MODPATH5) eller "Node" (for MODPATH7).

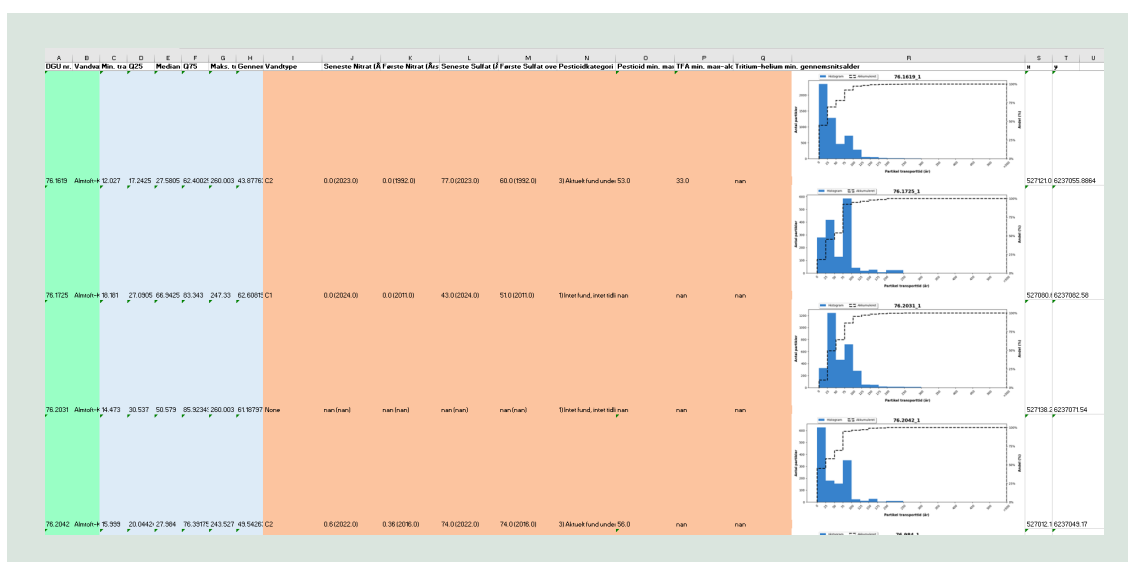
- Origo X- og Y-koordinater.

Output fra Processeringsværktøjet er histogrammerne over beregnede transporttider samt et Excel-ark, som ligger i mappen "Chemical Validation". Excel-arket indeholder en linje for hver boring med simulerede transporttider, vurdering af vandkemi, som beskrevet neden for samt et histogram.

Excel-arket indeholder:

- Histogram over beregnede transporttider til hver boring
- Statistik for transporttider fra grundvandsspejlet til boring med en middel-, median, minimum- og maksimumværdi samt 25% og 75% fraktil.
- Vurderet vandtype ud fra vandkemi (A, B, C1, C2 eller D)
- Målte nitrat- og sulfatkoncentrationer
- Evt. fund af pesticider og TFA med vurderede minimumsaldre
- Evt. aldersdatering

Et eksempel på hvordan Excel-arket ser ud kan ses på FIGUR 7.



**FIGUR 7.** Eksempel på Excel-arket til kemiske validering. De blå kolonner indeholder statistik omkring transporttiden. De orange kolonner indeholder kemiske parametre, der skal bruges til at udføre den kemiske validering.

TABEL 3 viser en sammenstilling af udvalgte pesticidstoffer og relevante metabolitter med angivelse af det år, hvor stoffet første gang blev anvendt. Det er disse anvendelsesår, der udregnes fra i de vurderede minimumsaldre for pesticider. For enkelte ældre stoffer, hvor præcist år ikke foreligger før 1956, er første anvendelsesår angivet som 1955. Oplysningerne anvendes til tidsmæssig kontekstualisering i relation til fund og historisk anvendelse.

**TABEL 3.** Oversigt over stoffer og deres første anvendelsesår anvendt i klassificeringen

| Stoffets navn     | Første anvendelsesår |
|-------------------|----------------------|
| 4-CPP             | 1959                 |
| DEIA              | 1957                 |
| 2,4-dichlorphenol | 1955                 |
| BAM               | 1965                 |
| Pentachlorbenzen  | 1955                 |

|                                                     |      |
|-----------------------------------------------------|------|
| 2,6-DCPP                                            | 1963 |
| Desethylatrazin                                     | 1960 |
| Desisopropylatrazin                                 | 1957 |
| Glyphosat                                           | 1975 |
| Hexazinon                                           | 1978 |
| Imazalil                                            | 1977 |
| Metalaxyl                                           | 1981 |
| Metribuzin                                          | 1973 |
| Desaminometamitron                                  | 1977 |
| Desaminodiketometribuzin                            | 1973 |
| Diketometribuzin                                    | 1973 |
| 2,6-dichlorbenzoesyre                               | 1965 |
| Dichlorprop                                         | 1963 |
| Mechlorprop                                         | 1959 |
| Atrazin                                             | 1960 |
| Simazin                                             | 1957 |
| AMPA                                                | 1975 |
| Bentazon                                            | 1974 |
| Monuron                                             | 1955 |
| Desisopropylhydroxyatrazin                          | 1957 |
| Didealkylhydroxyatrazin                             | 1957 |
| TFMP                                                | 1991 |
| Desphenylchloridazon                                | 1964 |
| PPU (IN70941)                                       | 2001 |
| Methyldesphenylchloridazon                          | 1964 |
| CGA 108906                                          | 1981 |
| DMS                                                 | 1966 |
| Alachlor ESA                                        | 1970 |
| Dimethachlor ESA                                    | 1981 |
| Dimethachlor OA                                     | 1981 |
| Propachlor ESA                                      | 1968 |
| 2,6-dimethyl-phenylcarbamoyl-methansulfonsyre       | 1981 |
| Chlorothalonilamidsulfonsyre                        | 1986 |
| Metaldehyd                                          | 1955 |
| CGA 62826                                           | 1981 |
| R471811                                             | 1986 |
| (2,6-dimethylphenyl)(2-sulfoacetyl)amino-eddikesyre | 1981 |
| LM6                                                 | 1973 |
| LM5                                                 | 1973 |
| LM3                                                 | 1973 |

Grundvandskemiske data er udtrukket fra Jupiterdatabasen og efterfølgende analyseret. Disse inkluderer:

### **Vandtype:**

Oxiderede vandtyper (A og B) indikerer grundvand, som er dannet efter 1960, og vandtype C2 ( $\geq 70$  mg/l sulfat) eller C1 med forhøjet sulfatindhold peger i samme retning, under den forudsætning, at det forhøjede sulfatindhold skyldes oxidation af sulfider i jordlagene med nitrat som oxidationsmiddel.

Denne tolkning bygger på, at landbrugets kvælstofoverskud steg kraftigt fra midt i 1960'erne. Omvendt er der ikke belæg for generelt at konkludere at vandtype C1 med normale sulfatindhold eller vandtype D er dannet før 1960.

### **Nitrat:**

Et højt nitratinhold indikerer altid forureningssårbart grundvand, mens grundvand uden nitrat (og ilt) generelt er bedre beskyttet.

Ved påvisning af nitrat  $> 1$  mg/l bliver vandtypen oxideret enten A eller B.

Vær opmærksom på falske nitratinhold. Der kan dannes op til ca. 3 mg/l nitrat ved oxidation af ammonium.

### **Sulfat:**

Baggrunds niveau for sulfat i Danmark i det vand, der strømmer ud af rodzonen, kan antages at være 20-50 mg/l.

Generelt indikerer et højt sulfatindhold ( $> ca. 50$  mg/l) relativt ungt grundvand, som er sårbart overfor forurening fra jordoverfladen.

Motsat indikerer et lavt sulfatindhold ( $< ca. 20$  mg/l) godt beskyttet grundvand mod nitrat, men ikke nødvendigvis gammelt vand.

### **Pesticider:**

Pesticidanvendelsen i Danmark tog fart efter 2. Verdenskrig, men først i 1956 begyndte en egentlig registrering af pesticidesalg.

For den praktiske anvendelse i aldersdatering er det imidlertid en udfordring, at pesticider og nedbrydningsprodukter har vidt forskellige fysisk/kemiske egenskaber. Stort set alle stoffer nedbrydes i et vist omfang i jord og grundvand, og stofferne har vidt forskellige sorptionsegenskaber, hvorfor transport igennem jordlagene samt i grundvandsmagasinerne foregår med forskellig hastighed. På baggrund af overstående kan der næppe udtrages anden information om grundvandets alder på baggrund af fund af pesticidstoffer, end at en vis andel af grundvandet må være dannet efter stoffets eller moderstoffets første anvendelsesår i Danmark.

### **Forklaring på min-maksalder:**

Der er for hver boring udregnet en estimeret maksimal grundvandsalder for hver forekomst af et pesticid i en prøve. Denne er baseret på, hvornår dette pesticid først blev brugt i Danmark. Dette er typisk først omkring 1956 og frem. Altså vil aldre i denne kolonne være max. 70 år.

For et givent indtag kan der være flere pesticidfund, hvert med sin egen beregnede maksimumalder. Der estimeres den strengeste (dvs. yngste) mulige alder for grundvandet baseret på pesticidfund, og den laveste af disse maksimumaldrer er angivet ved:

Minimum (beregnete maksimumaldrer) = laveste alder, som en del af grundvandet maksimalt kan have haft, da det blev dannet.

Altså er det et indikativt aldersestimater, der er ret konservativt.

Et eksempel:

Der er i en boring to pesticidfund:

- I 2014 blev der fundet BAM (første gang brugt i DK i 1965), og i 2021 blev der fundet Dichlorprop (første gang brugt i DK i 1963). Dvs. de to maksimale aldre, som en del

af grundvandet må være yngre end, bliver hhv. 2014-1965 = 49 år og 2021-1963 = 58 år.

- Med den konservative tilgang vælges minimum af disse maksaldre, og dermed skal en del af det dannede grundvand være lig med eller under 49 år gammelt.
- Hvis den beregnede minimumstransporttid til denne boring er 20 år, er dette i fin overensstemmelse med pesticidfund.
- Hvis der derimod beregnes en minimumstransporttid på over 100 år, er der en uoverensstemmelse, der enten kan skyldes en utæt boring, eller problemer med modellen.

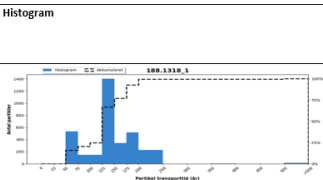
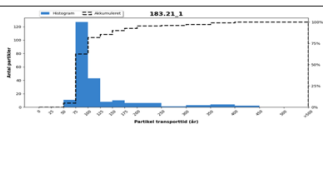
## TFA

Trifluoreddikesyre (TFA), dannes ved nedbrydning af afløsere for de CFC-gasser, som blev udfaset efter vedtagelsen af Montreal-protokollen i 1989. Tyske undersøgelser indikerer, at TFA stort set ikke forekom i regnvand før 1990, men at koncentrationen siden er steget kraftigt. TFA er imidlertid ikke jævnt distribueret i atmosfæren, men tydeligt forhøjede i beboede og industrialiserede områder.

På ovenstående baggrund kan TFA anvendes som indikator på indhold af grundvand, som er yngre end 1990 (hovedparten af vandet er dannet før), dog med forbehold for andre kilder, så som tidligere anvendelse af PFAS-pesticider eller udbringning af spildevandsslam i oplandet. Det er næppe muligt at korrelere koncentrationerne af TFA direkte med grundvandets alder, men det kan give nogle formodninger.

Tilsvarende, hvis der ikke er påvist TFA i et indtag kan det formodes, at hovedparten af vandet er ældre end fra 1990.

I FIGUR 8 ses to eksempler på vurderinger i den kemiske validering. For den første boring ses en god overensstemmelse mellem de kemiske parametre og beregnede transporttider, men for den anden boring er der uoverensstemmelse mellem fund af pesticid og TFA og beregnede transporttider, som kræver nærmere undersøgelse.

| Vandtype | Seneste nitrat | Første nitrat | Seneste sulfat | Første sulfat over > 50 mg/l | Pesticid-kategori                 | Pesticid min. max-aldre | TFA min. max-aldre | Tritium-helium | Histogram                                                                            | Vurdering                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|----------|----------------|---------------|----------------|------------------------------|-----------------------------------|-------------------------|--------------------|----------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| D        | 0.0 (2025.0)   | 0.0 (2016.0)  | 0.6 (2025.0)   | nan (nan)                    | 2) Intet fund, men tidligere fund | 41.0                    | nan                | nan            |  | Overensstemmelse mellem kemiske parametre og histogram.<br><br>Den modellerede min. transporttid er 58 år.<br><br>Det kan diskuteres om det fund der er af pesticider er korrekt, der findes kun én påvisning fra 2022 af 2,6-Dimethylphenyl(2-sulfoacetyl)aminojeddikesyre på 0,01 mg/l.<br><br>Vandtype, nitrat og sulfat indikerer et magasin som ikke er overfladepåvirket med nitrat.                                                  |
| D        | 0.0 (2024.0)   | 0.0 (1990.0)  | 2.2 (2024.0)   | nan (nan)                    | 5) Aktuelt fund over grænseværdi  | 41.0                    | 34.0               | nan            |  | <b>Ikke overensstemmelse mellem kemiske parametre og histogram.</b><br><br>Den modellerede min. transport tid er 68 år.<br><br>Der er påvist pesticider og TFA, som indikerer, at der indvindes en vis mængde vand med en maksimum alder på hhv. 41 og 34 år. Ud fra fundet af TFA kunne der være en formodning om, at hovedparten af vandet var dannet før 1990 (altså maksimalt en aldre på 35 år), hvilket ikke fremgår af histogrammet. |

**FIGUR 8.** Eksempler på 2 vurderinger ifm. kemisk validering. For den første boring ses der en overensstemmelse mellem de kemiske parametre og histogrammet, men det gør der ikke for den anden boring.

# Bilag 3. MODFLOW: Eksempler på modelopsætning og stokastiske beregninger

I dette bilag beskrives specifikke opsætninger for en MODFLOW/MODPATH model som uddybning til afsnit 3.2-3.4.

## Opsætning af partikler

Partiklerne placeres i lag 1 så tæt på grundvandsspejlet som muligt. Hvis cellen indeholder en drænrandbetingelse placeres partiklerne f.eks. 0,3 m under niveauet på dræn. Hvis drænet er tættere på bunden af cellen end 0,3 m, placeres partiklen så tæt på bunden af cellen som det er muligt.

Der kan være områder med større mægtighed af den umættede zone som i MODFLOW resulterer i tørre celler i det øverste modellag. Derfor **skal** *drape* aktiveres i MODPATH 7, så partiklerne flyttes ned til det øverste vandspejl. FIGUR 9 viser et eksempel på filen med startplaceringer, hvor *drape* er aktiveret ved at sætte værdien i kolonne 8 lig 1.

|         |   |   |     |            |            |      |   |   |
|---------|---|---|-----|------------|------------|------|---|---|
| 1       |   |   |     |            |            |      |   |   |
| 1       |   |   |     |            |            |      |   |   |
| 2299129 | 0 |   |     |            |            |      |   |   |
|         | 1 | 7 | 112 | 0.07142857 | 0.07142857 | 0.05 | 0 | 1 |
|         | 1 | 7 | 112 | 0.07142857 | 0.2142857  | 0.05 | 0 | 1 |
|         | 1 | 7 | 112 | 0.07142857 | 0.3571429  | 0.05 | 0 | 1 |
|         | 1 | 7 | 112 | 0.07142857 | 0.5        | 0.05 | 0 | 1 |
|         | 1 | 7 | 112 | 0.07142857 | 0.6428571  | 0.05 | 0 | 1 |

FIGUR 9. Eksempel på MODPATH7 .sloc-fil hvor kolonnerne er lag, række, kolonne, x, y, z, tidsforskydning, drape.

## Ustruktureret grid

Ved ustruktureret grid (Quad-Tree) skal tætheden af partikler ved start være minimum 49 partikler per hektar og uniform i hele modellen. Der skal også være partikler placeret i alle cellerne. Det betyder, at der vil være tilfælde, hvor partikeltætheden er over 49 per hektar.

I tilfældet hvor en model har basisgrid på 100 m x 100 m, som er forfinet med quadtree ned til 6,25 m x 6,25 m, vil antallet af partikler i cellerne af forskellige størrelser være som i TABEL 3, da der skal være minimum 1 partikel i de mindste celler. Dette følger denne formel:

$$\text{Partikel antal} = \left( \frac{\text{største cellestørrelse}}{\text{mindste cellestørrelse}} \right)^2$$

Eksempelvis:

$$\text{Partikel antal} = \left( \frac{100}{6,25} \right)^2 = 16^2 = 256$$

**TABEL 4. Antal partikler i celler af varierende størrelse i en model med ustruktureret grid.**

|                        |      |      |    |    |     |
|------------------------|------|------|----|----|-----|
| Celle bredde/højde [m] | 6,25 | 12,5 | 25 | 50 | 100 |
| Antal partikler        | 1    | 4    | 16 | 64 | 256 |

I processeringsværktøjet sættes antallet af "partikler/celle" efter antallet af partikler per største celle, da denne angiver gridstørrelsen på resultatfilerne fra værktøjet.

## Stop- og registreringszoner

I MODPATH 7 registreres partikler i magasinlag ved brug af registreringszoner. En registreringszone er en matrix med samme dimensioner som modelgriddet, hvor hver celle indeholder en værdi, som angiver enten et magasin eller et dæklag.

Hvert magasin i modellen, hvor der skal registreres partikler, skal tildeles et unikt nummer. Hvis den underliggende hydrostratigrafi er baseret på FOHM, kan det med fordel være numre, som refererer til disse hydrostratigrafiske enheder f.eks. 1200, 1400, 2100 osv., men det kan lige så godt være en simpel nummerering som 1, 2, 3. Dæklag og magasiner som ikke ønskes inkluderet i registreringen kan tildeles værdien 0.

Til magasinsspecifik grundvandsdannelse kræver processeringsværktøjet en resultatfil for hvert magasin. For hvert unikt magasinnummer skal der derfor foretages en separat partikelbaneberegning, hvor det pågældende magasin anvendes som stopzone. Derfor gennemføres beregningerne for et magasin ad gangen.

I MODPATH 7 er en stopzone et område, der i registreringszonen er tildelt et specifikt nummer, som angiver, at partiklen skal stoppe her. Registreringszonen kan altså genbruges i alle beregningerne, mens kun stopzonen ændres fra beregning til beregning. FIGUR 10 viser et eksempel på en MODPATH 7 simuleringsfil, hvor stopzonen er sat til 1200, og navnet på outputfilen er navngivet "1200\_mag.mpend" for at afspejle den valgte stopzone.

```
M_ref_mp.mpnam
M_ref_mp.mplst
1 1 1 1 0 0
1200_mag.mpend <- output filnavn
0
1
0
2
2
1200 <- stopzone
INTERNAL 1 (254I10) -1 #zones layer 1
0 0 0 0 0 0
```

**FIGUR 10. Eksempel på MODPATH7 mpsim-fil til beregning af partikler til magasin 1200.**

Til registrering af partikler i indvindingsboringer anvendes ligeledes en registreringszone med samme dimensioner som modelgriddet. Hvert magasin tildeles et unikt nummer, men numrene findes udelukkende i de celler, hvor modellen indeholder indvindingsboringerne, for hvilke der skal beregnes SGO. Nummereringen til indvindingsboringerne kan være konsistent med nummeringen af magasinerne.

I modsætning til estimeringen af magasinspecifik grundvandsdannelse skal der for indvindingsboringerne ikke angives en specifik stopzone i MODPATH, og denne tildeles derfor værdien -1 (FIGUR 11). Derimod aktiveres funktionen "stop at weak sinks" (værdi = 2), hvilket sikrer, at et tilstrækkeligt antal partikler ender i indvindingsboringerne. Output filnavnet tilpasses så det tydeligt fremgår, at filen vedrører indvindingsboringer. Der laves kun en samlet beregning, som inkluderer alle indvindingsboringer, og der skal ikke gøres noget ekstra, hvis der er flere indvindingsboringer i samme celle.

```
M_ref_mp.mpnam
M_ref_mp.mplst
1 1 2 1 0 0 <- stop at weaksink
filt.mpend <- output filnavn
0
1
0
2
2
-1
INTERNAL 1 (254I10) -1 #zones layer 1
0 0 0 0 0
```

**FIGUR 11. Eksempel på MODPATH7 mpsim-fil til beregning af partikler til filtre. Værdien som styrer, hvorvidt partikler skal stoppe ved weak sinks, er markeret med rød ring.**

Til beregning af SGO bruges kun endepunkterne, og det er derfor ikke nødvendigt at gemme partikelbane- eller tidsseriefiler, hvilket reducerer både beregningstiden og lagringsplads signifikant. Da partiklernes udgangspunkt skal være identiske i alle beregninger kan start positionerne (.slocs-filen) genbruges i beregning til indvindingsboringer og magasinspecifik grundvandsdannelse, hvilke sparer lidt ekstra tid i opsætningen.

## MODPATH 7 opsætning i Groundwater Modelling System (GMS)

Groundwater Modelling system (GMS) er en brugerflade til MODFLOW til at bygge og simulere hydrologiske modeller. GMS understøtter ikke MODPATH 7, men benytter version MODPATH 5. GMS kan godt genere det nødvendige antal partikler, men MODPATH 5 er begrænset til at køre med 500.000 partikler, hvilke ofte ikke er nok til at håndtere det nødvendige antal partikler. De to versioner har tilnærmelsesvis samme filopbygning og -struktur, men er dog ikke helt ens. Hvis der arbejdes med en MODFLOW model, som er bygget i GMS med behov for mere end 500.000 partikler, kan opbygning af filer til kørsel i MODPATH 7 passende tage udgangspunkt i filer genereret til en MODPATH 5 opsætning gennem GMS. Ud fra MODPATH 5 filerne kan der relativt nemt skabes de nødvendige input til MODPATH 7 filerne for startplacering af partikler arrays der indeholder registreringszoner samt porøsiteter.

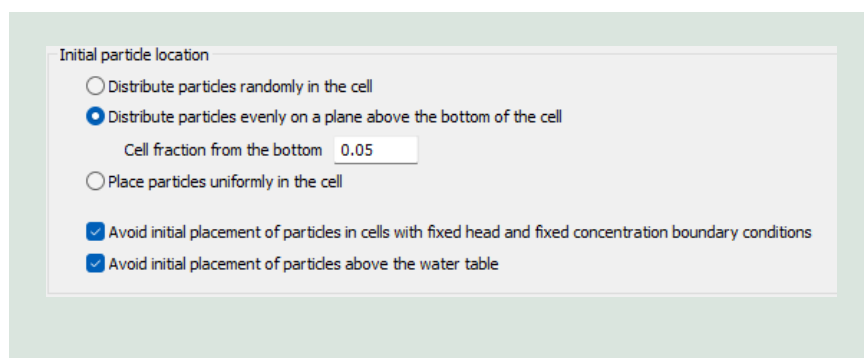
For modeller i GMS der er opstillet ved brug af *materials*, kan disse *material IDs* anvendes som registreringszoner til MODPATH. Dette gøres ved at man i "eksportere" *material IDs* (3D datasæt → grid) når man står i Zonetyper array under LPF-menuen (layer property flow). Denne fil kan så evt. ændres via regnemaskinen i GMS inden den importeres i zone code array via MODPATH menuen.

# Bilag 4. MIKE SHE: Eksempler på modelopsætning og stokastiske beregninger

I dette Bilag beskrives specifikke opsætninger for en MIKE SHE model som uddybning til afsnit 3.2-3.4.

## Opsætning af partikler

I MIKE SHE defineres partikelplaceringen til 3D grundvandsdannende områder som en horisontal jævn fordeling i en celle. Ved et tyndt modellag 1 på f.eks. 2-5 meter, placeres partiklerne i en vertikal afstand på 5 % af lagtykkelsen fra bunden af laget 1, som vist i FIGUR 12. Denne placering er anvendt, for at partiklerne starter så terrænnært (tæt på vandspejlet) som muligt, men samtidig minimere, at partikler forsvinder i dræn. Da partiklerne placeres i forhold til bunden af lag 1, kan det risikeres at nogle partikler placeres over vandspejlet. Partikler placeret over vandspejlet er immobile indtil vandspejlet stiger til deres elevation. Hvis vandspejlet aldrig stiger over partiklerne, vil de være immobile i hele simuleringsperioden. Partikler placeret i fixed head/concentration celler bliver fjernet med det samme, da disse celler fungerer som sinks. "Avoid initial placement of particles above the water table" og "Avoid initial placement of particles in cells with fixed head/concentration" kan med fordel vinges af for at undgå dette (FIGUR 12).



**FIGUR 12. Horisontal og vertikal placering af partikler i en MIKE SHE model til 3D grundvandsdannelse**

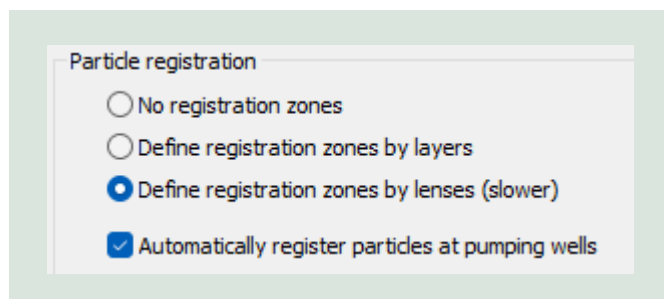
## Registreringszoner

I en MIKE SHE model registreres partiklerne i indvindingsmagasinerne via *registration zones* første gang de ankommer til en celle, der er defineret med en registreringszone. Registreringszonerne til 3D grundvandsdannelse til magasiner skal defineres som linser med udbredelse af magasinet, top- og bundkoter af magasinet samt en registreringskode pr. magasin, FIGUR 13

Metoden med registreringszoner i linser er mere beregningstungt end registreringszoner i modellag, men ved registrering af partiklerne i modellag kan der opstå en fejl, hvis et eller flere

modellag umiddelbart over magasinlaget tynder ud, og derved får samme egenskaber som magasinlaget. Partiklerne vil enten blive registreret med en højere transporttid, når de når beregningslaget for magasinet, eller have risiko for slet ikke at blive registreret i magasinet, hvis de aldrig når ned i selve beregningslaget for magasinet.

Bliver modellen for langsom at køre med registreringszoner i linser, og er magasinerne entydigt defineret i modellagene for magasinerne, kan registreringszonerne defineres i modellag.



**FIGUR 13. Registreringszoner for partikler til magasiner**

## Udtræk af partikler

Partikler udtrækkes til både indvindingsboringer og til registreringskoderne defineret for hvert indvindingsmagasin.

Ved boringer med en lille indvinding i forhold til vandgennemstrømningen i cellen, hvor boringen står, betegnes indvindingen fra boringen som en "weak sink", og der er risiko for at kun få partikler fjernes i boringen. I dette tilfælde kan man ved udtræk af partikler fjerne fluebenet ved "Only extract removed particles" under partikeludtrækket, for at sikre at alle partikler, der kommer ind til cellen med boringen registreres. Processeringsværktøjet fjerner partikler, der registreres dobbelt.

### 3DGVD (magasin)

☒ Create separate shape files for each extracted item  
☐ Additionally, create separate files for each numerical layer  
☐ Create additional text file

**Filters**

**Layer filter**  
☒ Extract particles originating in all layers  
 Top layer: 1  
 Bottom layer: 5

**Time filter**  
☒ Extract all release dates  
 Release dates between 05-10-2000 and 05-10-2500  
☒ Extract all travel times  
 Extract travel times between 0 and 500.332 years

**Extraction of starting location**

**Wells**  
☐ Extract particles by destination well name  
☐ Only extract removed particles  
☒ Extract all wells

**Sink Codes**  
☐ Extract particles by destination sink code  
☐ Extract all sink codes

**Well Fields**  
☐ Extract particles by destination well field  
☒ Extract all well fields

**Registration Codes**  
☒ Extract particles by destination registration code  
☒ Extract all registration codes

### GDO (boringsfilter)

☐ Create separate shape files for each extracted item  
☐ Additionally, create separate files for each numerical layer  
☐ Create additional text file

**Filters**

**Layer filter**  
☒ Extract particles originating in all layers  
 Top layer: 1  
 Bottom layer: 5

**Time filter**  
☒ Extract all release dates  
 Release dates between 05-10-2000 and 05-10-2500  
☒ Extract all travel times  
 Extract travel times between 0 and 500.332 years

**Extraction of starting location**

**Wells**  
☒ Extract particles by destination well name  
☒ Only extract removed particles  
☐ Extract all wells

|   | Well Name  |
|---|------------|
| 1 | 198.715_1  |
| 2 | 198.655_1  |
| 3 | 198.656_1  |
| 4 | 198.319A_1 |
| 5 | 198.319B_1 |
| 6 | 198.453_1  |

**Sink Codes**  
☐ Extract particles by destination sink code  
☐ Extract all sink codes

**Well Fields**  
☐ Extract particles by destination well field  
☒ Extract all well fields

**Registration Codes**  
☐ Extract particles by destination registration code  
☒ Extract all registration codes

**FIGUR 14.** Eksempel på partikeludtræk til hhv. magasiner (3DGVD) og indvindingsboringer (GDO) i MIKE SHE

## Eksempel på Autocal opsætning til følsomhedsanalyse

Anvendes AutoCal til følsomhedsanalysen med en MIKE SHE model skal man være opmærksom på, at følgende opsætning skal benyttes for at beregne Standardafvigelsen for parametrene (se FIGUR 14):

- "No transformation" for aggregering af objektivfunktionerne.
- For hvert observationspunkt (*Output measure*) til objektivfunktionerne skal statistikken defineres som *RMSE*.
- Hver objektivfunktion skal defineres som *Weighted sum of squares*.

### Objective Functions

**Evaluation period**

Start date: 23-10-2009 00:00:00

End date: 01-10-2019 00:00:00

**Aggregation of objective functions**

No transformation

**Objective functions**

|   | Name | Function type           | Weight |
|---|------|-------------------------|--------|
| 1 | H    | Weighted sum of squares | 1      |
| 2 | Q    | Weighted sum of squares | 1      |

**Output measures**

|   | Name     | Output file               | Item name | Target file               | Item name | Statistic type | Weight below | Weight above | Function name |
|---|----------|---------------------------|-----------|---------------------------|-----------|----------------|--------------|--------------|---------------|
| 1 | 76.185_1 | V:\Grundvandsmodellert... | 76.185_1  | V:\Grundvandsmodellert... | 76.185_1  | RMSE           | 1            | 1            | H             |
| 2 | 76.266_1 | V:\Grundvandsmodellert... | 76.266_1  | V:\Grundvandsmodellert... | 76.266_1  | RMSE           | 1            | 1            | H             |
| 3 | 76.800_1 | V:\Grundvandsmodellert... | 76.800_1  | V:\Grundvandsmodellert... | 76.800_1  | RMSE           | 1            | 1            | H             |
| 4 | 76.811_1 | V:\Grundvandsmodellert... | 76.811_1  | V:\Grundvandsmodellert... | 76.811_1  | RMSE           | 1            | 1            | H             |

**FIGUR 15.** Eksempel på opsætning af AutoCal til følsomhedsanalyse

Erfaringer fra tidligere projekter viser, at standardafvigelserne bestemt via AutoCal ofte bliver små, som derfor medfører for snævre intervaller bestemt som beskrevet i afsnit 4.2.1, hvorfor

metoden med valg af bredere intervaller og efterfølgende frasortering af modeller, afsnit 4.2.3, kan anvendes.

## Eksempel på kørsler af stokastiske modeller

Når parametersæt er udvalgt til de stokastiske kørsler, kan disse med fordel køre som *Scenario runs* i Autocal, se eksempel i FIGUR 15. Herved udskrives resultatet for objektivfunktionen automatisk til sammenligning med referencemodellen. De stokastiske kørsler opdeles i sæt, i forhold til hvor mange samtidige kørsler, der kan foretages på beregningscomputeren, og der opsættes en Autocal-fil for hver sæt af modelrealisationer. Grundet instabilitet i Autocal er det dog generelt anbefalet at køre modellerne som stand alone.

| Scenario Runs                                                                                                     |             |             |             |            |            |            |            |           |             |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|------------|------------|------------|------------|-----------|-------------|
| Scenario type                                                                                                     |             |             |             |            |            |            |            |           |             |
| <input type="radio"/> Single run using initial parameter values<br><input checked="" type="radio"/> Multiple runs |             |             |             |            |            |            |            |           |             |
| Parameters                                                                                                        |             |             |             |            |            |            |            |           |             |
|                                                                                                                   | KvartaerLer | KvartaerLer | KvartaerLer | Sand1200_V | Sand1400_K | Sand2100_S | Sand7600_N | DrainC    | DrainL_fact |
| 1                                                                                                                 | 3.251e-09   | 0.121       | 3.251e-09   | 0.001002   | 0.0001442  | 0.0002     | 7.178e-05  | 1.972e-07 | 1           |
| 2                                                                                                                 | 7.328e-09   | 0.072       | 2.938e-09   | 0.0006039  | 0.0002649  | 0.0002449  | 9.727e-05  | 1.875e-07 | 1.5         |
| 3                                                                                                                 | 6.295e-09   | 0.181       | 1.77e-09    | 0.0008185  | 0.0001371  | 0.0001205  | 0.0001076  | 1.455e-07 | 1.406       |
| 4                                                                                                                 | 5.984e-09   | 0.113       | 6.295e-09   | 0.0005741  | 6.745e-05  | 0.0002328  | 0.0001023  | 9.226e-08 | 0.813       |
| 5                                                                                                                 | 3.597e-09   | 0.166       | 7.328e-09   | 0.000861   | 0.0002931  | 0.0001146  | 0.0001191  | 9.705e-08 | 0.938       |
| 6                                                                                                                 | 6.622e-09   | 0.064       | 3.09e-09    | 0.0006353  | 0.0001954  | 0.0002851  | 6.166e-05  | 2.183e-07 | 0.563       |
| 7                                                                                                                 | 6.966e-09   | 0.173       | 2.399e-09   | 0.0007031  | 0.0001303  | 0.0001268  | 4.111e-05  | 3.622e-07 | 0.531       |

FIGUR 16. Eksempel på opsætning af kørsel af stokastiske realisationer med AutoCal



## Teknisk vejledning til beregning af 3D Grundvandsdannelse med stokastiske beregninger

Denne tekniske vejledning beskriver Miljøstyrelsens metode til beregning af 3D grundvandsdannelse ved hjælp af stokastiske grundvandsmodelberegninger. Beregningerne anvendes som grundlag for identifikation af sårbare grundvandsdannende områder (SGO). Formålet er at identificere de områder, hvorfra der sker en betydelig grundvandsdannelse af relativt ungt vand til indvindingsboringer og grundvandsmagasiner.

Vejledningen beskriver den samlede arbejdsgang fra en godkendt grundvandsmodel til beregning og kvalitetssikring af 3D grundvandsdannende områder. Dette omfatter opsætning af strømnings- og partikelbaneberegninger, vurdering af transporttider samt anvendelse af grundvandskemiske data til validering af modelresultaterne.

For at belyse usikkerheden gennemføres stokastiske beregninger, hvor relevante modelparametre varieres inden for realistiske intervaller. De enkelte modelrealisationer evalueres og kvalitetssikres, hvorefter resultaterne sammenstilles for at beskrive variationen og robustheden af de beregnede grundvandsdannende områder.



Miljøstyrelsen  
Lerchesgade 35  
5000 Odense C

[www.mst.dk](http://www.mst.dk)