

Simuleren van 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming: MOCDENS3D

Repliek op de reactie van Wim de Lange op het artikel door Gualbert Oude Essink in STROMINGEN 4 (1998), nr 1

De Lange's reactie op mijn artikel is nogal uitgebreid. Ik wil in mijn repliek zijn opmerkingen puntsgewijs nalopen.

MOCDENS3D te complex voor grootschalig modelleren

De Lange stelt dat MOCDENS3D te veel RAM-geheugen nodig heeft om grootschalige problemen door te rekenen. Het is inderdaad zo dat er nog geen grootschalige problemen met MOCDENS3D zijn doorgerekend, maar dat komt voornamelijk doordat de techniek pas recent beschikbaar is. Dat neemt niet weg dat op een 'gangbare' PC het grootste NAGROM-deelmodel (dat van Noord-Nederland) alleen met grote elementen nagebouwd kan worden. Bij problemen in de orde van grootte van 30 x 35 km bij 100 m diepte is de benodigde omvang van het RAM-geheugen beheersbaar (ongeveer 345 Mbyte bij 8 deeltjes per element van 100 x 100 x 10 m en ongeveer 775 Mbyte bij 27 deeltjes per element). Op die manier kan het zoute deel van Nederland met tien deelmodellen beschreven worden (plus enkele kleinere modellen voor Zeeland en de Waddeneilanden). Daar komt bij dat de kosten van extra RAM-geheugen (128 Mbyte kost f 350,—, prijsniveau zomer 1998) op zijn minst te overzien is. Als test is voor de MODFLOW'98-conferentie een drie-dimensionaal probleem doorgerekend. De relevante parameters zijn $L = B = 10$ km, $D = 150$ m, $\Delta x = 100$ m, $\Delta y = 100$ m, $\Delta z = 10$ m, en 27 deeltjes per element: in totaal 150.000 elementen hetgeen overeen komt met onge-

veer 110 Mbyte RAM-geheugen. Zonder problemen is een periode van in totaal 400 jaar doorgerekend in tijdstappen van 0,25 jaar. Van numerieke instabiliteiten, zoals door de Lange gesuggereerd, was hierbij geen sprake.

Initiële dichtheidsverdeling

Het aanbrengen van een initiële concentratie – of eigenlijk dichtheidsverdeling – kan inderdaad een tijdrovende klus zijn, met name als veel gegevens over de dichtheid beschikbaar zijn. Contrasten in dichtheid moeten ook bij MOCDENS3D secuur worden opgegeven, omdat anders instabiliteiten ontstaan in de snelheidsverdeling. In tegenstelling tot MVAEM gebruikt MOCDENS3D echter geen 3D interpolatietechniek voor de dichtheid: de initiële dichtheid wordt net als alle andere bodemparameters voor elk knooppunt opgegeven.

Dispersie

Zoals bekend is bij stoftransport in grondwater de hydrodynamische dispersie in de meeste gevallen ondergeschikt aan advectie. Derhalve is De Lange's opmerking juist dat in de meeste gevallen van de globale grootschalige modelleerpraktijk dispersie niet hoeft worden meegenomen (overigens kan MOCDENS3D ook zonder hydrodynamische dispersie rekenen). Echter, lokaal kunnen in kustgebieden waar een niet-uniforme dichtheidsverdeling heerst, grote concentratiegradiënten en grote stroomsnelheden optreden (zoals bij grondwateronttrekkingen ten behoeve van de drinkwatervoorziening). Hier kan hydrodynamische dispersie wél belangrijk zijn, zeker als men een lange periode wil simuleren. Ik zou zodoende zeker de mogelijkheid willen openhouden om hydrodynamische dispersie te kunnen modelleren. MVAEM sluit dit uit.

Niet-stationariteit

In mijn artikel heb ik hiermee niet de elastische bergingsverschijnselen bedoeld, maar de verplaatsing van het zoute grondwater en de daardoor veroorzaakte veranderingen in het snelheidsveld.

Veruit het grootste gedeelte van MOCDENS3D regelt het proces om deeltjes in het grid aan te brengen en te verplaatsen. Ook bij MVAEM worden de dichtheidspunten meerdere keren verplaatst. Door deze handeling raakt MVAEM eigenlijk zijn oorspronkelijke unieke analytische karakter kwijt. Dat is op zich niet verkeerd, maar op deze manier is MVAEM wat dit aspect betreft een 'gewone' code geworden met standaard problemen zoals het steeds opnieuw toevoegen van dichtheidspunten in infiltratiegebieden en de bepaling van de grootte van de tijdstap: wanneer is de dichtheidsverdeling zodanig veel veranderd dat het stromingsveld opnieuw moet worden berekend?

Opmerkingen betreffende MOCDENS3D

MOCDENS3D is geen nieuwe techniek, maar een koppeling van MODFLOW en MOC. Veel mensen zijn al bekend met stoftransport en de deeltjesverplaatsingstechniek zoals gebruikt in MOC en MT3D (MT3D is afgeleid van MOC). MOCDENS3D sluit hierbij aan. Nieuw is de koppeling tussen grondwater en stoftransport om dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming te modelleren.

De oorspronkelijke code MOC3D, door de US Geological Survey ontwikkeld en regelmatig aangepast, is 'public domain'. De aanpassing van de code ten behoeve van MOCDENS3D is door de Universiteit Utrecht (ICHU) uitgevoerd, en de code is gratis.

Bij veel standaard 3D eindige-elementen- en eindige-differentie-codes waarmee stoftransport wordt gemodelleerd is de grootte

van het element gelimiteerd door de longitudinale dispersiviteit (numeriek Peclet-getal). Bij MOCDENS3D is dat niet het geval. De eerlijkheid gebiedt mij te zeggen dat de massabalans van de stoftransport module in MOCDENS3D niet het sterkste punt is: deze is namelijk niet (altijd) sluitend en vraagt zodoende nog aandacht. Hierop aansluitend ben ik benieuwd naar de nauwkeurigheid in de massabalans van MVAEM.

Tot slot

Het is een goede zaak dat er meerdere programma's beschikbaar zijn voor vraagstukken in gebieden met een niet-uniforme dichtheidsverdeling. Ik zie dan ook liever de programma's naast elkaar dan tegenover elkaar. Mijns inziens is er nog geen techniek superieur, en heeft elke methode zijn specifieke voordelen. De techniek zoals gebruikt in MOCDENS3D is veelbelovend. Zo is Kiwa (Van Gerven e.a.) momenteel bezig dezelfde numerieke techniek in te bouwen in de code MT3D96 in plaats van de module MOC. Een uitbreiding van de code naar warmte-transport in poreuze media is onderweg.

Gualbert Oude Essink

g.oude.essink@geo.uu.nl

<http://www.geo.uu.nl/~goe/>

Faculteit der Aardwetenschappen
ICHU, Universiteit Utrecht

Reactie op verslag **NAGROM-gebruikersdag**, 11 juni 1998 door Harry Boukes

Allereerst zijn wij natuurlijk blij dat Harry ook diep onder de indruk is van "NAGROM als fantastisch instrument voor hydrologisch Nederland", van de mogelijkheden om te verfijnen en te plakken en knippen. Net als Harry vinden wij ook het data beheer

uiterst belangrijk. Dit is dan ook ons vertrekpunt voor een systematische reactie op zijn verslag.

Het doel was om een dag te organiseren waarop gebruikers aan het woord werden gelaten over hun bevindingen en redenen om NAGROM in te zetten voor een bepaald hydrologisch vraagstuk. Harry heeft gelijk als hij sommige van de presentaties zwak vond. Ook de geluidsvoorziening tijdens sommige presentaties had beter gekund. Over dat laatste had wellicht al beter tijdens de eerste lezing een opmerking van achteruit de zaal (waar Harry zat) gemaakt kunnen worden, dan hadden we daar direct op in kunnen spelen. Hiervan hebben wij geleerd dat voor een dergelijk (onverwacht) groot gezelschap een aanpassing in de voorbereiding op zijn plaats is.

Jammergenoeg is het verslag van Harry op diverse punten onjuist, onvolledig en ongenuanceerd. Evenals het presenteren van een goed verhaal vraagt ook het schrijven van een goed verslag om zorgvuldige voorbereiding en grote communicatieve vaardigheden. Eigenlijk is de term verslag onjuist en zou het stuk 'persoonlijke impressies van Harry Boukes' moeten heten. We zullen onze bezwaarpunten in volgorde van het verslag behandelen.

In zijn stuk stelt Harry dat "NAGROM beschouwd zou kunnen worden als de opvolger van de Grondwaterkaart, een project dat beschouwd wordt als zijnde afgerond". Echter, de grondwaterkaart is gecontinueerd in de vorm van REGIS. In de loop der tijd zullen steeds nieuwe gegevens en inzichten in REGIS worden opgenomen. REGIS beschouwen wij daarom als de opvolger van de Grondwater kaart van Nederland en dus als de basis geohydrologische data set. De NAGROM database is een interpretatie daarvan die toch wel redelijk beïnvloed is door de schaal van het model en

de gebruikte modelleertechniek. Binnen NAGROM worden wel verschillende schalen onderscheiden en de bijbehorende informatie als zodanig opgeslagen.

De gekscherende formulering over het kiezen van MLAEM door Theo Olsthoorn, dat hij "een week lang allerlei programma's had bekeken, en geconcludeerd had dat MLAEM het slimst zou zijn" staat misschien wel grappig in een persoonlijke column, maar is niet gepast in een verslag. De keuze van Gemeente Waterleidingen Amsterdam om MLAEM te gebruiken was gebaseerd op het zo ver als gewenst en herhaald kunnen verfijnen in een deel van een model zonder dat het overige deel van het model moet worden herzien / opnieuw moet worden opgebouwd. In die zin is in dit geval MLAEM echt het slimste programma en had Theo Olsthoorn dat goed gezien. NAGROM heeft voor dit model de randvoorwaarde (gebied tot en met de Utrechtse Heuvelrug) aangeleverd.

Jammergenoeg heeft Harry alleen nog uit de lezing van Jos Moorman opgepikt "dat er werd gewezen op rekenkundige situaties waarbij de resultaten van MLAEM beïnvloed kunnen worden door de elementgrootte". Niet zo bijzonder lijkt ons. Dat de resultaten van een MLAEM model beïnvloed worden door element grootten is niet anders dan bij elk ander model. Ook bij het gebruik van eindige elementen en eindige differentie methoden geldt dat de spreidingslengte een belangrijke maat voor de grootte van de elementen is. Als de elementen (ook in bijvoorbeeld MODFLOW of Micro-Fem) veel groter dan de spreidingslengte worden genomen, kan de flux factoren (vaak 2 à 5) fout zijn. Dit zou iedere hydroloog moeten weten. Het blijkt alleen vaak niet zo te worden uitgevoerd en in deze zin noodzaakt MLAEM eerder tot het exact uitzoeken en moeten opvolgen van de voorwaarden waaronder accuraat gemodelleerd kan worden.

Ook wat motivatie van de provincie Friesland betreft, gaat Harry te kort door de bocht. De provincie Friesland heeft voor NAGROM gekozen omdat het als enig bestaand model met de drie-dimensionale dichtheidsverdeling rekening kan houden en omdat de NAGROM database onderhouden en beheerd zal blijven. Het punt dat Harry wel noemt (reeds gekalibreerd model) wordt uit zijn verband gerukt. De dichtheidsverdeling was gekalibreerd. Het modelgebied is daarna verfijnd. De resultaten zijn vergeleken met de kalibratie dataset die voor dit gebied in NAGROM voor handen is.

Harry wijst op de gevaren van het vlotte gebruik van een kant en klaar model als NAGROM. Daar zit misschien wat in, maar dat geldt in feite voor alle openbare informatie. De gebruiker van een model, van de grondwater kaart, van REGIS of van andere basisgegevens blijft altijd zelf ervoor verantwoordelijk dat de nauwkeurigheid van het door hem gebruikte model voldoet aan de eisen die bij de gestelde vraag horen. In die zin is het commentaar van Harry over het gebruik van NAGROM waar, maar niet terzake bij de demonstratie van Wim de Lange. Bovendien heeft Wim herhaaldelijk verteld dat de gebruiker lokaal nog verder aanpassingen kan (en vaak moet) doen.

Het eerste voorbeeld (de bouwput binnen twee Maasgeulen) liet zien hoe heel snel inzicht kan worden verkregen op basis van de bestaande modelschematisatie. In een dergelijke geval is het antwoord binnen minuten beschikbaar. Dergelijke eenvoudige ingrepen kunnen binnen NAGROM over heel Nederland worden uitgevoerd.

In het tweede voorbeeld werd binnen de relatief grote elementen een variatie in weerstandswaarde en oppervlakte water peil aangebracht. In dit geval komt het verschil tussen een analytisch element en elk ander type element het sterkst naar voren: binnen een analytisch (oppervlakte) element

varieert de verticale stroming op een zeer hoogwaardige manier: door op vele punten de randvoorwaarden (bijvoorbeeld peil en weerstand) op te geven wordt een continue en variërend stromingsveld berekend binnen een element. De rand van het element is in feite niet meer dan een beëindiging van het interpolatie veld. Met randen worden sprongen in de verticale stroming gemodelleerd. In feite is een zo'n analytisch element krachtiger /exacter dan tientallen (soms wel honderden) elementen van ander methoden.

De demonstratie maakte ook duidelijk dat de vorm van de rivier exact in het model kan worden opgenomen en op snelle en eenvoudige wijze.

Het voorbeeld van het slootje diende alleen om aan te geven dat ook op zeer kleine schaal verfijnd kan worden. In zulke gevallen moet de modelleur dus al goed naar het uitgangsmodel hebben gekeken. Plaatselijke fouten van een meter moeten dan ook altijd door de modelleur worden geïnterpreteerd als het ontbreken van voldoende detail in het model. En daarover ging nu deze demonstratie.

Bij het schrijven over de ontwikkelingen rond NAGROM veegt Harry bij elkaar dat de aansluiting op REGIS en het niet-stationair worden binnen twee jaar zal zijn afgerond. De eerste grote afstemming met de delen van REGIS die reeds zijn voltooid willen we proberen binnen twee jaar te voltooiën. Echter, dat MLAEM dit najaar niet-stationair is geworden, betekent niet dat NAGROM dat ook al voor heel Nederland al is of binnen afzienbare tijd zal worden gekalibreerd. Het signaal moet worden opgevat als dat de liefhebber van dergelijke activiteiten nu ook met NAGROM/MLAEM aan de gang kan gaan.

En dan "er werd nog één vraag gesteld" ofwel de prijs van het geheel. Hierbij raakt Harry een gevoelig en moeilijk punt. Het in stand houden van een organisatie en het

beheren en verbeteren van een databestand kost (veel) geld. De gebruikers betalen niets voor alle inspanningen die er nu al in zitten. De koppeling met REGIS kost niets en hoort bij het verbeteren van NAGROM.

Onze opzet was om de kosten van onderhoud en beheer ten dele te laten dragen door gebruikers door per model gebruikerskosten in rekening te brengen. De samenstelling van de gebruikerskosten is beschreven in de folder en iedereen kan onafhankelijk van de gebruikersondersteuner (TAUW) zijn of haar prijs bepalen. Het stuk van Harry over dit punt (de positie van TAUW bij het opvragen in offerte stadium) is dan ook volledig onjuist.

Diezelfde gebruikers hebben later ook weer behoefte aan een aangepast model waarin ook hun verbeteringen zijn opgenomen. Het maken onderhouden van een model kost de gebruiker ook inspanning en dus geld en dus mag voor een dergelijke prestatie een wederdienst gevraagd worden. De vraag is alleen wat is het (de gebruiker) waard. Als een der belangrijkste gebruikers heeft Rijkswaterstaat behoefte aan een zo goed mogelijk model. Daarom worden ook de kosten van de organisatie door Rijkswaterstaat gedragen.

Op het gebied van de prijsstelling en de openstelling van zowel NAGROM als van MLAEM zijn op dit moment sterke ontwikkelingen gaande, mede op basis van de tot nu toe opgedane ervaringen. Het karakter van de leveringsvoorwaarden (voor wat hoort wat) zal veranderen in de mate waarin tegenprestatie wordt gevraagd en zeker op een wijze die Harry Boukes en andere hydrologen in Nederland als muziek in de oren zal klinken.

Wim de Lange (RIZA)
Hans van der Meij (NITG-TNO)
Jan Hoogendoorn (TAUW bv)

Naschrift van de auteur

Als recensent beschouw ik mezelf als een willekeurige bezoeker die het gebodene op zich af laat komen. Mijn waarnemingen zet ik vervolgens op papier. Het is mogelijk dat ik met een dergelijke aanpak inhoudelijk niet alle details doorgrond, maar een willekeurige bezoeker doet dat ook niet. Ik laat in het midden of dat aan de presentatie of aan de luisteraar ligt.

Uiteraard probeer ik ook bij andere bezoekers te peilen of mijn indrukken een breder draagvlak hebben. Dat heb ik ook op de NAGROM-gebruikersdag gedaan. Op basis daarvan, maar in feite ook op basis van de reactie van Wim, Hans en Jan concludeer ik dat ik de hoofdlijnen zo slecht nog niet heb waargenomen:

- 1 NAGROM is een mooi produkt, maar niet op alle problemen toepasbaar;
- 2 De presentaties waren aan de magere kant;
- 3 De leveringsvoorwaarden konden beter.

Harry Boukes

Waterscheiding als modelrand

(Reactie naar aanleiding van Hatsi-kD In STROMINGEN jrg 4, nr 3)

In het verleden werd ik er bij het begeleiden van modelstudies en het beoordelen van modeluitkomsten regelmatig mee geconfronteerd dat de waterscheiding als modelrand werd ingevoerd.

De belangrijkste reden was meestal dat de reken capaciteit beperkt was (in modellen kon je slechts een beperkt aantal knooppunten opnemen; ik praat dan over de 70-er jaren). Dit had tot gevolg dat het modelgebied zo klein mogelijk werd gehouden. Dat betekende al gauw dat een modelrand niet direct op de (hydrologisch gezien) meest logische plaats werd gelegd. Andere factoren

dan hydrologische gaven vaak de doorslag bij de keuze van een modelgrens. Twee daarvan wil ik hieronder de revue laten passeren.

De belangrijkste overweging voor een modelrand op de waterscheiding was in mijn ervaring dat er geen stroming over die rand van het model plaatsvond. Dat maakt modelleren veel eenvoudiger (dichte rand of vaste potentiaal). Er was een soort 'koudwaternet' om modelranden niet te laten samenvallen met waterscheidingen. Als je modelranden niet liet samenvallen met een waterscheiding haalde je je allerlei problemen op de hals door rekening te moeten houden met stroming over die rand.

Invloeden van een ingreep die zich uitstrekten tot over de rand (en die gaan zoals Kees Maas terecht schrijft ver over dergelijke waterscheidingen heen) kwamen dan voren in de vorm van potentiaalverlagingen op de rand of in de vorm van stroming over de rand. In hoeverre dat de modelberekeningen nadelig beïnvloedde, werd beoordeeld op basis van een maximaal toelaatbare stroming(sverandering) over de rand. Daar werd meestal een percentage van de omvang van de ingreep voor aangehouden. De omvang van de invloed buiten de modelrand werd of verwaarloosd of omschreven in algemene termen (geen kwantificering).

Discussies daarover waren soms zeer ingrijpend; voortzetting van die discussie tot voor de Raad van State bij beroepen tegen vergunningen was geen uitzondering.

Bij een beek of rivier die als waterscheiding fungeert is het probleem minder groot als de ingreep in het watervoerende pakket plaatsvindt waarin de beek/rivier insnijdt. Problemen ontstonden als in dieper gelegen watervoerende pakketten ingrepen doorge-rekend moesten worden en de rivier nauwelijks invloed had in die pakketten. Dan werd regelmatig de rivier toch als modelrand

aangehouden waardoor de effecten verkeerd werden berekend.

Een ander argument dat opgeld deed was dat het modelgebied op die manier samen-viel met het balansgebied. Dat maakte het opstellen van waterbalansen eenvoudiger. De waterbalans speelde in die tijd nog een belangrijke rol bij de vergunningverlening via de 'winbaar geachte hoeveelheden grondwater'. De 'winbare hoeveelheden' waren gekoppeld aan een percentage van de 'nuttige neerslag' binnen het balansgebied (voor het gemak vergat men dat dit alleen voor de nulsituatie geldt want na een ingreep is er een andere waterscheiding en daarmee ook een andere waterbalans).

Eerst op het moment dat de rekenfaciliteiten meer mogelijkheden boden, werd het probleem minder. Voor enkelen was het toen wel schrikken hoe groot de invloed van ingrepen in bijvoorbeeld grote infiltratiegebieden werkelijk bleek te zijn. (Zie bijvoorbeeld de modelstudie van Gehrels voor de Veluwe: 'Niet-stationaire grondwatermodellering op de Veluwe', VU Amsterdam 1995.)

Ik hoop met deze ervaring enig zicht te hebben gegeven op het ontstaan van het gebruik van de waterscheiding als modelrand.

Voorburg, 4 november 1998

Harm Janssen

Dienst Landelijk Gebied
Postbus 3010
2270 JB Voorburg
Telefoon: (070) 337 13 45
Fax: (070) 369 44 85
e-mail: h.janssen@dlg.agro.nl

