
Aquapodium promovendis

Sommige Nederlandse waterschappen en provincies zijn aan de slag gegaan met het vlakdekkend vaststellen van het GGOR. Daarbij is het vaak handig om snel te weten te komen hoe bepaalde ingrepen (reductie drinkwaterwinning, verandering oppervlaktewaterpeil) doorwerken op bijvoorbeeld het freatisch grondwaterstandsverloop. De meeste grondwatermodellen doen er vaak uren over om tot een adequate oplossing voor dit rekenprobleem te komen. Terecht heeft TNO-NITG gemeend dat dit rekenen ook sneller en slimmer zou moeten kunnen. Peter Vermeulen werkt in het kader van zijn promotie-onderzoek aan methoden om dit alles mogelijk te maken. Zodoende levert zijn promotie-onderzoek niet alleen een bijdrage aan de hydrologie als (toegepaste) wetenschap, maar ook aan de wensen die duidelijk leven bij de Nederlandse waterbeheerders.

Meta-modellen

Inleiding

Het is alweer drie jaar geleden dat ik met mijn promotieonderzoek begonnen ben. Voor die tijd heb ik me ruim 7 jaar bij het huidige TNO-NITG bezig gehouden met geohydrologisch modelonderzoek. Mijn eerste rekenmodel bestond toentertijd (1995) nog uit een eenvoudig netwerk met ruim achttienduizend rekenknooppunten, dat voor de toenmalige generatie PC's (486DX2, 66 MHz), toch ook nog een behoorlijke klus bleek. Mede door de invloed van GIS-systemen (waardoor het pre- en postprocessen van regionale modellen op slimme en effectieve wijze kan worden uitgevoerd), zijn computermodellen veel toegankelijker geworden dan voorheen en horen nu bij het standaardinstrumentarium om een maatschappelijk geaccepteerd antwoord te geven op tal van hydrologische vraagstukken. Er worden momenteel regionale modellen ontwikkeld – met meer dan 200 miljoen rekenknooppunten – waarmee op 'lokale' schaal (25 meter) scenario's worden doorgerekend. Ook al heeft de rekenchip zich de laatste decennia explosief ontwikkeld, deze vraag vanuit de markt noodzaakt een rekenin-

spanning die op de huidige generatie PC's niet te draaien is. Dit laatste geldt voor zowel de hardware (geheugen, schrijfruimte, etc.) als de rekentijden van het model (1 dag en meer). Zie hier mijn uitdaging: 'Reduceer het grondwater model tot haar essentie zodat – zonder dat dit leidt tot een significant verlies in nauwkeurigheid – minder rekentijd vereist is'.

Onderzoekssporen

Mijn promotieonderzoek wordt gefinancierd door TNO-NITG en aangezien zij voornamelijk de rekencode MODFLOW (McDonald en Harbaugh, 1988) gebruikt, is mijn onderzoek hoofdzakelijk gericht op dit type model (eindige-differentie rekenschema). Het andere type model, MicroFem (Hemker en Nijsten, 1996), is gestoeld op een andere wiskundige discretisatie (eindige-elementen rekenschema), wat niet wegneemt dat bepaalde – tot nu toe behaalde resultaten voor Modflow – ook voor MicroFem geschikt zijn. De oplossingen, om van een model de rekentijden significant te reduceren, zijn:

- I **Het definiëren van een gereduceerd model.** Dit concept gaat uit van het feit dat de oorspronkelijke differentiaalvergelijking (Laplace) mogelijk vereenvoudigd kan worden om het eenvoudige diffuse gedrag van grondwater (of op zijn minst de observaties op een beperkt aantal locaties) te beschrijven. Hoe eenvoudiger de vergelijkingen, des te sneller het model zal zijn.
- II **Het reduceren van het aantal rekenknooppunten.** Een ander concept – dat wat betreft 'idee' verreweg het eenvoudigst is, maar dat wat betreft uitvoering allerminst is – ziet de opbouw van het model als scenariospecifiek en verdicht en vergroot het modelnetwerk naar gelang daarvan.

Gedurende de eerste twee jaar van mijn

promotieonderzoek heb ik uitvoerig spoor I behandeld en zijn hierover al een aantal congresbijdragen en tijdschriftartikelen verschenen. Spoor II heeft nu mijn meeste aandacht en resultaten hierover zijn binnenkort publiceerbaar. Hieronder geef ik van beide een korte samenvatting.

Gereduceerd model

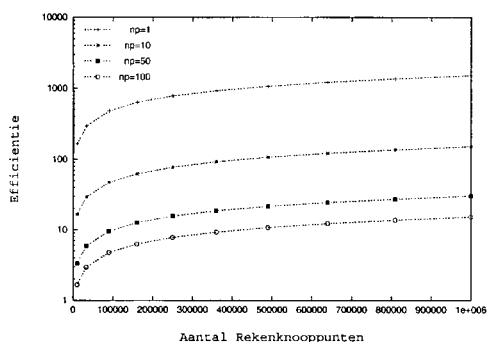
RUIMTELEER

Een gereduceerd model is mogelijk als het oorspronkelijke model niet de volledig 'numerieke ruimte' nodig heeft (lees: de 'ruimte' waarin een mogelijke oplossing zich kan bevinden). Voor een grondwatermodel is dit gelijk aan een n -dimensionale ruimte waarbij n het aantal rekenknooppunten voorstelt. In principe kan ieder rekenknooppunt elke positie in de ruimte innemen, ware het niet dat ze door een diffusie-vergelijking aan elkaar verbonden zijn. Hierdoor is hun gedrag veel voorspelbaarder en lijken bovendien veel oplossingen op elkaar, waardoor het mogelijk is om de 'overige ruimten' – waar toch geen oplossing bestaat – te verwijderen. Dit doet men door de oorspronkelijke modelformulering te vertalen naar een formulering die alleen binnen de gereduceerde ruimte kan fungeren. Vergelijk het geheel met een puntenwolk in de ruimte dat door een minimaal aantal vectoren 'strak' omspannen kan worden. Deze projectietechniek is binnen andere disciplines niet nieuw en is wiskundig uitgebreid beschreven door Newman (1996) en veelvuldig toegepast in onder andere de vloeistofdynamica (Hoffman Jorgensen en Sorensen, 2001, Park en Cho, 1996). Een nadeel van de methode is dat het oorspronkelijke model noodzakelijk blijft om een puntenwolk van oplossingen te genereren.

Op een slimme wijze kan deze rekeninspanning wel tot een minimum beperkt blijven (Vermeulen e.a., 2004a). Een stationair model, dat bijvoorbeeld fijn resoluut de

verlaging als gevolg van een winning in een sterk heterogeen veld doorrekenen, kan door één kegelvormige functie beschreven worden die vermenigvuldigd wordt met een coëfficiënt. Op tweeërlei wijze kan deze door een gereduceerd model verkregen worden (Vermeulen e.a., 2004b). Dit type model kan dan natuurlijk alleen een winningvariatie voor het gegeven parameterveld doorrekenen, maar is vele malen sneller dan het oorspronkelijke model; zie figuur 1. De functies kunnen ook uitgebreid worden, zodat zij ook de variatie in parameterisatie vertegenwoordigen zodat een gereduceerd model ontstaat dat voor ‘inverse modellering’ geschikt is (Vermeulen e.a., 2004c). Dit onderdeel is nog niet helemaal afgesloten en het idee bestaat nog om:

- 1 bij de vervaardiging van een gereduceerd model meer nadruk te leggen op datgene dat belangrijk is voor de gradiënt van de doelfunctie en niet op datgene dat belangrijk is voor een correcte nabootsing van het originele model; en
- 2 de correlatie mee te nemen tussen patronen en ondergrond parameterisering waardoor gedurende de parameteroptimalisatie meer processen in gereduceerde ruimte kunnen plaatsvinden.



Figuur 1: Relatie tussen de efficiëntie van het gereduceerde model t.o.v. het oorspronkelijke model Modflow bij een variërend aantal rekenknooppunten en patronen (np) (uit Vermeulen e.a., 2004b).

TOEPASSINGEN

De meest geschikte toepassing van deze techniek ligt op het gebied van lineair programmeren (Greenwald, 1998). Hierbij worden oplossingen van hydrologische vraagstukken geoptimaliseerd waarbij veelvuldig het gereduceerde model geraadpleegd moet worden. Ik denk hierbij aan het optimaliseren van een onttrekkingstrategie en of een waterhuishoudkundige ingreep. De initiële inspanning om het gereduceerde model te vervaardigen wordt daarna zeker terugverdiend.

Reduceren van het aantal knooppunten: scenariospecifiek modelleren

OPSCHALING

De rekensnelheid van het model wordt al in een vroeg stadium bepaald door de gekozen verdichting van het modelnetwerk. Gedurende de gehele modellering moet men zich nu hieraan conformeren, wat het ongewenste effect kan hebben op onnodig lange rekestijden. De gekozen netwerkverdichting is namelijk niet altijd noodzakelijk voor elk scenario. Door het model nu alleen daar te verdichten waar het relevant is, en daarbuiten sterk te vergroten, neemt het aantal rekenknooppunten sterk af, wat de rekensnelheid ten goede komt. Dit ogenschijnlijke eenvoudige concept dwingt een ‘robuuste’ opschaling af, waarbij de stromingsflux gelijk blijft bij een overeenkomend verval in stijghoogte. Deze beperkingen maakt het reduceren van het aantal rekenknooppunten zo ingewikkeld. Het opschalen van doorlatendheden in de hydrologie wordt in de literatuur breed uitgemeten (Renard en Marsily, 1997; Bierkens en Van der Gaast, 1998; en anderen) en varieert van heuristische (o.a. het netwerk aanpassen op de stromingsconditie), deterministische (analytisch en numeriek) tot statistische (o.a. geometrisch gemiddelde) algoritmen. Met uitzondering van de deterministische

numerieke techniek, zijn deze technieken niet generiek. Daarnaast is er nog weinig gepubliceerd over het opschalen van randvoorwaarden, topsystemen en winningen (een eerste aanzet is weliswaar gegeven door Wolfsteiner e.a., 2003). Het laatste jaar van mijn promotie behelst onder andere de verschillende facetten van numeriek opschalen (Wen e.a., 2003).

TOEPASSING

Een belangrijke toepassing is gelegen in de inverse modellering, waarbij voor ieder meetpunt nu een specifiek opgeschaald model gemaakt wordt. De rekentijd van al deze modellen samen is veelal minder dan deze van het oorspronkelijke model alleen. Dit komt zeker ten goede aan de rekeninspanning die noodzakelijk is voor een recent ontwikkelde parameteroptimalisatietechniek (Valstar e.a., 2004). Daarnaast is het concept gevangen in een gebruikervriendelijke applicatie (iMOD) waarmee het construeren van vraagspecifieke modellen en de achterliggende opschaling verwerkt zijn.

Nieuw?

Nu het eind van mijn promotie in zicht is, overvalt mij het onbehagen gevoel van: "is dit alles wel voldoende en bovenal vernieuwend?". Dit is, gezien mijn ambitieuze lijst met onderzoeksvragen, gesteld aan het begin van mijn promotie, wel te begrijpen. In het begin lijkt alles nog mogelijk, en naarmate je promotieonderzoek vordert zie je steeds meer overeenkomsten met andere onderzoeken. Het heeft mij zeker drie jaar gekost om alle aanwezige kennis te begrijpen (een voordeel maar ook een nadeel van het Internet) en sommige wiskundige oplossingen daadwerkelijk te implementeren. Echt vernieuwend bezig zijn vergt hierdoor erg veel tijd en hopelijk lukt het me in de staart van mijn onderzoek toch nog om een nieuw 'ding' te doen.

Literatuur

- Bierkens, M.F.P. en J.W.J. van der Gaast (1998)** Upscaling hydraulic conductivity: theory and examples from geo-hydrological studies; in: *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, vol 50, pag 193–207.
- Greenwald, R.M. (1998)** Documentation and Users Guide: MODMAN, an Optimization Module for MODFLOW, Version 4.0, HIS GeoTrans, Freehold, New Jersey.
- Hemker, C.J. en G.J. Nijsten (1996)** *Groundwater Flow Modeling Using MicroFem: Version 3*; Hemker Geohydroloog Amsterdam.
- Hoffmann Jorgensen, B. en J.N. Sorensen (2000)** Proper Orthogonal Decomposition and low-dimensional modeling, in: *ERCOFTAC Bulletin*, vol 46, pag 44-51.
- McDonald M.G. en A.W. Harbaugh (1988)** A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Groundwater Flow Model. U.S.Geological Survey, Open-File Report 83-875, Book 6, Chapter A1, 1988.
- Newman A.J. (1996)** Model reduction via the Karhunen-Loève expansion Part I: An exposition. Technical Report T.R. 96-32. Inst. Systems Research, University of Maryland in College Park, MD.
- Park, H.M. en C.H. Cho (1996)** Low dimensional modeling of flow reactors; in: *Int. J. Heat and Mass Transfer*, vol 39, nr 16, pag 3311–3323.
- Renard, Ph. en G. de Marsily (1997)** Calculating equivalent permeability: a review; in: *Adv. in Wat. Resources*, vol 20, pag 253–278.
- Valstar, J.R., D.B. McLaughlin, C.B.M. te Stroet en F.C. van Geer (2004)** A representer-based inverse method for groundwater flow and transport applications, in: *Water Resources Research*, vol 40, W05116, doi:10.1029/2003WR002922.
- Vermeulen, P.T.M., A.W. Heemink en C.B.M. te Stroet (2004a)** Reduced Mod-

els for Linear Groundwater Flow Models using Empirical Orthogonal Functions; in: *Advances in Water Resources*, vol **27**, pag 57–69.

Vermeulen, P.T.M., A.W. Heemink en C.B.M. te Stroet (2004b) Low-dimensional modeling of numerical groundwater flow; in: *Journal of Hydrological Processes*, vol **18**, pag 1487–1504.

Vermeulen, P.T.M., A.W. Heemink en J.R. Valstar (2004c) Inverse Modeling of Groundwater Flow using Model Reduction; in: *Water Resources Research*; ingezonden.

Wen, X.H., L.J. Durlofsky en M.G.

Edwards (2003) Use of border Regions for Improved Permeability Upscaling; in: *Math. Geology*, vol **5**, pag 521–547.

Wolfsteiner, C., L.J. Durlofsky en K.

Aziz (2003) Calculation of well index for nonconventional wells on arbitrary grids; in: *Comp. Geosciences*, vol **7**, pag 61–82.

Peter Vermeulen

TNO-NITG

p.vermeulen@nitg.tno.nl